

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

98-256

P17-98-256

В.Л.Аксенов, Б.Р.Гаджиев

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ МАГНИТНЫХ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛАХ
С ПЕРЕМЕННЫМ СОСТАВОМ $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$

Направлено в журнал «Кристаллография»

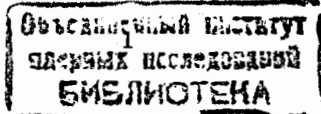
1998

Введение

Недавние нейтронографические магнитные и структурные исследования системы $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ для различных концентраций Fe и Pd показали, что даже очень маленькая концентрация железа при неизменной пространственной группе структуры радикально меняет магнитное состояние исходного соединения UPd_2Ge_2 [1].

Нейтронографические эксперименты показывают, что при температуре $T > T_N = 143 K$ соединение UPd_2Ge_2 имеет объемноцентрированную тетрагональную структуру типа $ThCrSi_2$ с пространственной группой симметрии D_{4h}^{17} [2]. В структуре этого соединения атомы занимают следующие кристаллографические позиции: U в $2(a)(000)$, $Pd(Fe)$ в $4(d)(0, 1/2, 1/4)$, Ge в $4(e)(0, 0, z)$, причем значение параметра z при $142 K$ равно $0,3816(2)$ и остается неизменным вплоть до температуры $1,4 K$ [1,2].

В первых нейтронографических исследованиях UPd_2Ge_2 [3, 4] ниже $T_N = 140 K$ была обнаружена магнитная структура антиферромагнитного (AF) типа с модулированной продольной волной спиновой плотности (LSDW). Затем было показано [5], что в районе $87 K$ и $50 K$ происходят фазовые переходы и что при низких температурах сосуществуют несколько магнитных фаз: AF, ферромагнитная (F), метамгнитная (MM) и спиновое стекло (SG). Однако нейтронографические эксперименты с лучшим разрешением и точностью показали [1], что при $1,4 K \leq T \leq 50 K$ магнитная структура UPd_2Ge_2 описывается соразмерной LSDW с "квадратной модуляцией" и с магнитным волновым вектором $\vec{k} = (0, 0, k_s)$, где $k_s \cong 3/4$ [6]. При $95 K \leq T \leq T_N (= 135 K)$ магнитная структура представляет собой несоразмерную структуру LSDW с синусоидальной модуляцией. В интервале $90 K \leq T \leq 95 K$ структура представляется смесью этих фаз и постепенно преобразуется из квадратной в синусоидально модулированную, при этом около $80 K$ происходит фазовый переход первого рода из соразмерной фазы в несоразмерную фазу, выражающийся в резком изменении величины k_s от 1 до $3/4$.



Нейтроннографические исследования показали [1], что 2% атома Fe , замещающего Pd , радикально меняют магнитную структуру UPd_2Ge_2 . Если в недопированном соединении магнитная структура при $T < 50 K$ представляет собой фазу LSDW с квадратной модуляцией, то в поликристаллическом $U(Pd_{0.98}Fe_{0.02})_2Ge_2$ ниже 65 K обнаружена "простая" AF-фаза и синусоидально модулированная LSDW-AF-фаза в интервале температур между 65 K и точкой Нееля $T_N = 135 K$. В интервале 65 K < T < 135 K магнитная ячейка несоразмерна с кристаллической, за исключением точки $T = 93 K$, где волновой вектор проходит через "соразмерное" значение 0,75. Ниже T_N магнитные моменты атома урана всегда параллельны тетрагональной оси с элементарной ячейкой. В нейтроннографических экспериментах фазы SG и FM не обнаружены [1].

В [3] исследованы концентрационные зависимости параметров решетки $a = a(x)$ и $c = c(x)$, объема элементарной ячейки $V = V(x)$ и расстояния между атомами урана $d = d(x)$. С увеличением x значения функций $a = a(x)$, $V = V(x)$ и $d = d(x)$ немонокотонно уменьшаются. Причем, в области $x \sim 0,02$ функции $a = a(x)$, $c = c(x)$, $V = V(x)$ и $d = d(x)$ имеют пологий участок. При дальнейшем увеличении x , $a = a(x)$ уменьшается, тогда как $c = c(x)$, $V = V(x)$ и $d = d(x)$ имеют максимумы при $x \sim 0,05$. Таким образом, при $x \sim 0,05$ происходит растяжение элементарной ячейки вдоль направления оси c . Температурные зависимости магнитной восприимчивости при изменении x приведены в работе [3]. Из этих кривых определены концентрационные зависимости критических температур магнитных фазовых переходов при T_{m_1} и T_{m_2} . Показано, что зависимость $T_N = T_N(x)$ почти постоянна, тогда как функция $T_{m_1}(x) = T_{m_1}(= 80 K)$ увеличивается и достигает значения $\sim 110 K$. Зависимость $T_{m_2}(= 50 K) = T_{m_2}(x)$ в области $x \in [0; 0,2]$ постоянна и при дальнейшем увеличении x значительно понижается. Необходимо подчеркнуть, что с увеличением x интенсивность пика магнитной восприимчивости при T_{m_2} стре-

мится к нулю. Интенсивность пика магнитной восприимчивости при T_{m_1} при $x \sim 0,02$ имеет значительный рост, а при дальнейшем увеличении x стремится к нулю. В [3] подчеркивается, что при $x \sim 0,02$ концентрация примесей Fe увеличивает магнитное разупорядочение структуры и указывается на существование трех различных фаз на фазовой диаграмме этих соединений при температурах $T < T_{m_2}$, $T_{m_2} < T < T_{m_1}$ и $T_{m_1} < T < T_N$ соответственно.

Топологическая деформация нетривиальной магнитной фазовой диаграммы $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ в зависимости от x , при неизменной пространственной группе симметрии, требует детального анализа симметричных аспектов последовательности фазовых переходов в этих соединениях. Данная работа посвящена этому анализу.

Феноменологическая теория последовательности магнитных фазовых переходов $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$

Для построения феноменологической теории последовательности магнитных фазовых переходов в кристаллах с переменным составом $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ в соответствии с вышеизложенными экспериментальными результатами необходимо подчеркнуть, что пространственной группой симметрии парамагнитной фазы этих соединений является симморфная группа D_{4h}^{17} , которой соответствует объемноцентрированная решетка типа Γ_q^v [7]. Основными векторами решетки являются

$$\vec{a}_1 = (-\tau/2, \tau/2, \tau_z/2), \quad \vec{a}_2 = (\tau/2, -\tau/2, \tau_z/2), \\ \vec{a}_3 = (\tau/2, \tau/2, -\tau_z/2).$$

Решетка типа Γ_q^v предполагает, что

$$\vec{a}_1 \perp \vec{a}_2 \perp \vec{a}_3 - \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \perp \vec{a}_3, \quad |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|.$$

Основные векторы обратной решетки определяются как

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_k = 2\pi\delta_{ik}.$$

С изменением x пространственная группа симметрии $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge$ не изменяется и является группой D_{4h}^{17} .

Волновым вектором модуляции магнитной структуры является вектор $\vec{k} = (0, 0, k_s)$; иррациональная часть k_s зависит от температуры и концентрации x , причем в несоизмерной фазе вблизи точки перехода в соизмерную фазу стремится к нулю.

Определим трансформационные свойства параметра порядка.

Векторные представления пространственной группы D_{4h}^{17} [6] приведены в таблице 1.

Таблица 1. Векторные представления пространственной группы D_{4h}^{17}

E	C_2	C'_2	C''_2
$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
u'_2	C_4	C'_4	u''_2
$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$
I	σ_h	σ_v	σ_d
$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$
σ'_v	S_4	S'_4	σ'_d
$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$

Псевдовекторные представления пространственной группы D_{4h}^{17} представлены в таблице 2.

Для симметричного анализа необходимо построить неприводимые представления пространственной группы D_{4h}^{17} , соответствующие волновому вектору $\vec{k} = (0, 0, k_s)$.

Определим малую группу $G_{\vec{k}}$ этого вектора [8, 9].

Таблица 2. Псевдовекторные представления пространственной группы D_{4h}^{17}

E	C_2	C'_2	C''_2
$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
u'_2	C_4	C'_4	u''_2
$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$
I	σ_h	σ_v	σ_d
$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
σ'_v	S_4	S'_4	σ'_d
$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$

Элементы группы C_{4v} оставляют вектор \vec{k}_0 неизменным и, следовательно, группа $G_{\vec{k}} = C_{4v}^9$ является малой группой.

Звезда вектора \vec{k} состоит из двух лучей:

$$* \vec{k} = \{ \vec{k}, -\vec{k} \}.$$

Сначала построим неприводимые представления симморфной группы C_{4v}^9 . Для этого заметим, что

$$C_{4v}^9 = C_{2v}^{20} + \sigma'_d C_{2v}^{20}.$$

Группа C_{2v} является изоморфной четверной группой Клейна [7] и, следовательно, имеет четыре одномерных неприводимых представления, которые приведены в таблице 3.

Таблица 3. Неприводимые представления четверной группы Клейна

C_{2v}	E	C_2''	σ_h	σ_v
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

Неприводимые представления A_1 и A_2 являются самосопряженными и составляют орбиту первого порядка соответственно. Неприводимые представления B_1 и B_2 не самосопряжены и составляют орбиту второго порядка. Следовательно, группа C_{4v} имеет четыре одномерных и одно двумерное неприводимое представление. Неприводимые представления пространственной группы C_{4v}^9 можно построить методом индуцированных представлений. Неприводимые представления группы C_{4v} приведены в таблице 4.

Таблица 4. Неприводимые представления группы C_{4v}

C_{4v}	E	C_2'	σ_h	σ_v	σ_v'	σ_d'	C_4	C_4'
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
R_5	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

Так как группа D_{4h}^{17} является симморфной, то число допустимых неприводимых представлений равно числу неэквивалентных неприводимых представлений точечной группы D_{4h} [7]. Число классов сопряженных элементов группы равно 10. Следовательно, так как порядок группы равен 16, то группа имеет восемь одномерных и два двумерных неприводимых представления [8], которые приведены в таблице 5.

Неприводимое представление пространственной группы D_{4h}^{17} соответствующей точке $\vec{k} = (0, 0, k_s)$ представляется выражением

Таблица 5. Характеры неприводимых представлений точечной группы D_{4h}

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	I	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0

$$D_0^* \vec{k} = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \cdot B_{1g},$$

где \vec{R} – вектор решетки.

Разложения псевдовекторного представления на узлах атомов урана по неприводимым представлениям пространственной группы D_{4h}^{17} имеют вид

$$\tau = B_{1g} \oplus E_g.$$

В магнитной дифракционной картине магнитные отражения идентифицируются векторами рассеяния $\vec{H} + \vec{k}$ (\vec{H} является вектором рассеяния ядерных отражений, \vec{k} – волновой вектор магнитной структуры). Вектор \vec{k} параллелен упорядоченным моментам ионов U . Направлением упорядочения моментов является тетрагональная ось c . Учитывая, что магнитный момент $\vec{\mu}$ параллелен оси c и \vec{k} является параллельным $\vec{\mu}$, мы можем выбрать компоненты магнитного момента таким образом, что $\mu^{(x)} = 0$, $\mu^{(y)} = 0$, $\mu^{(z)} \neq 0$.

Такой выбор подразумевает, что ось z направлена вдоль оси c , а x и y направлены вдоль осей a и b тетрагональной элементарной ячейки соответственно.

Следовательно, трансформационные свойства параметра порядка определяются одномерным неприводимым представлением $D_0^* \vec{k}_0$.

В соответствии с условием инвариантности, функционал термодинамического потенциала, описывающий последовательность фазовых переходов парамагнитная-несоразмерная-соразмерная фаза, представляется выражением

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

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

где d – период $\bar{\Phi}(z)$ и штрих означает производную по z . Введем в термодинамический потенциал дополнительный член, характеризующий энергию электронной подсистемы E_g допируемых в структуру UPd_2Ge_2 атомов Fe . Тогда член mE_g (m – концентрация допируемых атомов Fe) включает в себя изменение термодинамического потенциала электронной подсистемы за счет взаимодействия зон UPd_2Ge_2 и атомов Fe . Полагая, что $E(\eta)$ инвариантно по отношению к тем же преобразованиям симметрии, можно написать

$$E_g(\eta) = E_0 + \frac{a}{2} \eta^2 + \frac{b}{4} \eta^4 + \frac{\gamma'}{6} \eta^6 + \frac{\delta'}{2} (\eta')^2 + \frac{\lambda'}{2} (\eta'')^2 + \frac{\chi'}{2} \eta^2 (\eta')^2. \quad (3)$$

Следовательно, термодинамический потенциал соединений $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$, описывающий последовательность магнитных фазовых переходов типа парамагнитная-несоразмерная-соразмерная фаза, представляется выражением

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

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

где

$$\alpha = \alpha_0 + ma, \quad \beta = \beta_0 + mb, \quad \gamma = \gamma_0 + m\gamma',$$

$$\delta = \delta_0 + m\delta, \quad \lambda = \lambda_0 + m\lambda', \quad \chi = \chi_0 + m\chi'. \quad (5)$$

Термодинамический потенциал (4) с точностью до коэффициентов совпадает с термодинамическим потенциалом, рассмотренным в [10]. Далее проведен анализ термодинамического потенциала (4).

В исходной фазе $\eta = 0, \Phi = 0$.

В соразмерной фазе $\eta' = 0$

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

Из условия минимума Φ получаем решения

$$\eta_c = \pm \sqrt{\frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{2\gamma}},$$

которые соответствуют соразмерной фазе.

В соразмерной фазе термодинамический потенциал определяется выражением

$$\Phi_c = -\frac{6\alpha\beta\gamma - \beta^2 + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{24\gamma^2}. \quad (7)$$

В несоразмерной фазе уравнения для $\eta(z)$, которые обеспечивают минимум Φ , получаем из уравнения Эйлера

$$\lambda \eta^{IV} - \delta \eta'' - \chi [\eta^2 \eta'' + \eta (\eta')^2] + \alpha \eta + \beta \eta^3 + \eta \gamma^5 = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) может иметь периодическое решение с различным периодом d . Равновесный период d определяется условием $\delta\Phi/\delta d = 0$, которое в нашем случае принимает вид

$$\lambda \eta^{III} \eta' - \frac{\lambda}{2} (\eta'')^2 - \frac{\delta}{2} (\eta')^2 - \frac{\chi}{2} \eta^2 (\eta')^2 + \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 = \Phi. \quad (9)$$

Условиям равновесности (9) можно придать другой вид, если проинтегрировать по x от нуля до d и подставить Φ (4):

$$\int_0^d [2\lambda (\eta'')^2 + \delta (\eta')^2 + \chi \eta^2 (\eta')^2] dz = 0. \quad (10)$$

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

$$\eta = \rho_0 \cos qx \quad \rho_0^2 = \frac{4(\alpha_0 - \alpha)}{3\beta + 2\chi q_0^2}, \quad q = q_0 \left(1 + \frac{\rho_0^2 \chi}{8\delta}\right),$$

$$\alpha_0 = \frac{\delta^2}{4\lambda}, \quad q_0^2 = -\frac{\delta}{2\lambda}, \quad \Phi = -\frac{(\alpha_0 - \alpha)^2}{2(3\beta + 2\chi q_0^2)}. \quad (11)$$

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

Нахождение точного решения уравнения (9) осуществляется введением замены $Z = (\eta')^2$, и в результате получаем

$$\frac{\lambda}{8} \left[4Z \frac{d^2 Z}{d\eta^2} - \left(\frac{dZ}{d\eta} \right)^2 \right] - \frac{\delta}{2} Z - \frac{\chi}{2} \eta^2 Z + \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 - \Phi = 0. \quad (12)$$

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

$$\int [Z(\eta)]^{-\frac{1}{2}} = z - z_0, \quad (13)$$

где произвольную постоянную z_0 будем полагать $z_0 = 0$.

Решение будем искать в виде

$$Z = \frac{\chi}{8\lambda} c \eta^4 + \frac{\beta}{\chi} g_1 \eta^2 + \frac{\beta^2 \lambda g_0}{\chi^3}, \quad (14)$$

где неизвестные константы c , g_0 и g_1 сделаны безразмерными. Для определения параметров c , g_0 и g_1 подставим (14) в (12) и получим уравнения

$$\begin{aligned} 3c(c-1) + 8\tilde{\gamma} &= 0, \\ 2g_1(5c-4) &= \tilde{\delta}c - 4, \\ g_0(2-3c) &= 2(g_1^2 - \tilde{\delta}g_1 + \tilde{\alpha}), \\ \Phi &= \frac{\beta^2 \lambda^2 g_0(2g_1 - \tilde{\delta})}{2\chi^4}. \end{aligned} \quad (15)$$

Уравнение (13) дает действительные решения лишь при $Z > 0$. Кроме этого, интервал значений, при которых $Z > 0$, должен быть ограниченным, так как иначе величина η достигла бы бесконечных значений. В результате, в зависимости от знака χ и числа действительных корней уравнения $Z(\eta) = 0$, возможны три представляющих интерес случая: при $\chi < 0$ имеются два или четыре действительных корня; и при $\chi > 0$ — четыре действительных корня.

При $\chi > 0$ и $\beta g_1 < 0$ многочлен $Z(\eta)$ имеет четыре действительных корня. Из трех областей значений η , где $Z > 0$, нужно брать область между двумя внутренними корнями. Подставив (14) в (13) и вычисляя интеграл, получаем первое решение уравнения (9):

$$\begin{aligned} \eta &= \rho sn(pz, k), \\ \rho^2 &= -8 \frac{\beta \lambda k^2 g_1}{\chi^2 c (1+k^2)}, \\ p^2 &= -\frac{\beta g_1}{\chi(1+k^2)} \quad k^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - cg_0/2g_1^2}}{1 + \sqrt{1 - cg_0/2g_1^2}}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $sn(pz, k)$ — эллиптическая функция Якоби с модулем k , p — волновой вектор. Условия $0 < k < 1$ и $\beta g_1 < 0$ определяют ту область значений коэффициентов потенциала Φ , где решение (11) существует. Можно показать, что это решение отвечает равновесному состоянию несоразмерной фазы.

При анализе полученных результатов удобно поступать следующим образом. Подставив (16) в (10) и учитывая (15), представим условие (10) в виде

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{15}{10 + (2-3c)u_1}; \\ u_1 &= \frac{2(8 + 7\kappa^2 + 8\kappa^4)E(\kappa) - (1 - \kappa^2)(16 + 7\kappa^2)K(\kappa)}{(1 + \kappa^2)[(1 + \kappa^2)E(\kappa) - (1 - \kappa^2)K(\kappa)]}. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $K(\kappa)$ и $E(\kappa)$ — полные эллиптические интегралы с модулем k . Найдем из (15) $\tilde{\delta}$ и $\tilde{\alpha}$, выражая g_0 через k :

$$\tilde{\delta} = \frac{2}{c}[g_1(5c - 4) + 2],$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{g_1^2}{c^2(1 + \kappa^2)}[3c(3 + 2\kappa^2 + 3\kappa^4) - 8(1 + \kappa^2 + \kappa^4)] + \frac{4g_1}{c}. \quad (18)$$

Задавая c (т. е. фактически $\tilde{\gamma}$) и беря разные значения κ , из (17) получаем g_1 , при этом нужно следить, чтобы выполнялось условие $\beta g_1 < 0$. Из (18) вычисляем $\tilde{\alpha}$ и $\tilde{\delta}$, при которых решение (16) может отвечать равновесию. Можно показать, что с понижением температуры волновой вектор p монотонно уменьшается и при $\kappa \rightarrow 1$ стремится к нулю. Температурная эволюция пространственного распределения решения $\eta = \rho sn(pz, k)$ в несоразмерной фазе представлена на рис. 1.

При $\chi < 0$, если $g_0 < 0$, многочлен (14) имеет только два действительных корня. Имеется только одна область, где $Z > 0$, и вместо (16) получим

$$\eta = \rho sn(pz, \kappa), \quad \rho^2 = \frac{8\beta\alpha\kappa^2 g_1}{\chi^2 c},$$

$$p^2 = -\frac{\beta g_1}{\chi} \quad k^2 = \frac{1}{2}[1 \pm (1 - \frac{cg_0}{2g_1^2})^{-1/2}], \quad (19)$$

где $\tilde{g}_1 = g_1/(1 - 2\kappa^2)$, а знак в выражении для κ^2 должен быть противоположен знаку βg_1 . Из (19) видно, что должно быть также $\beta \tilde{g}_1 > 0$. Условие равновесности (10) в данном случае дает соотношение

$$\tilde{g}_1 = \frac{15}{10(1 - 2\kappa^2) + (2 - 3c)u_2},$$

$$u_2 = \frac{(1 - \kappa^2)(16 - 23\kappa^2)K(\kappa) - 2(8 - 23\kappa^2 + 23\kappa^4)E(\kappa)}{(1 - \kappa^2)K(\kappa) - (1 - 2\kappa^2)E(\kappa)}. \quad (20)$$

Найдем из (15) $\tilde{\delta}$ и $\tilde{\alpha}$, выражая g_0 через k :

$$\tilde{\delta} = \frac{2}{c}[(1 - 2\kappa^2)(5c - 4)\tilde{g}_1 + 2],$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{\tilde{g}_1}{c}[(1 - 2\kappa^2)^2(9c - 8) + 4\kappa^2(1 - \kappa^2)(3c - 2)] + \frac{4\tilde{g}_1}{c}(1 - 2\kappa^2). \quad (21)$$

Из (21) вычисляем значения $\tilde{\alpha}$ и $\tilde{\delta}$, при которых решение (19) может отвечать равновесию. При приближении к точке T_c , при этом ($\kappa \rightarrow 1$), волновой вектор модуляции монотонно уменьшается и вблизи T_c стремится к нулю. Обратим внимание на то, что в случае решения $\eta = \rho sn(pz, \kappa)$, когда $\chi < 0$, несоразмерная фаза существует и при $\chi < 0$, причем с понижением температуры, возможна последовательность переходов исходная - соразмерная - несоразмерная фаза. Переход несоразмерная - соразмерная фаза является переходом первого рода, что можно увидеть из структуры решения $\eta = \rho sn(pz, \kappa)$. Дело в том, что функция $sn(pz, \kappa)$ в отличие от $sn(pz, \kappa)$ близка к нулю на большей части периода при $k \rightarrow 1$. Поэтому в случае решения $\eta = \rho sn(pz, \kappa)$ домены с соразмерной структурой, где $\eta = \eta_c \neq 0$, не образуются даже в зародышевом состоянии и непрерывный переход в соразмерную фазу невозможен. Температурная эволюция пространственного распределения решения $\eta = \rho sn(pz, k)$ в несоразмерной фазе представлена на рис. 2.

Рассмотрим случай, когда $\chi < 0$, $\beta g_1 < 0$ и многочлен (14) имеет четыре действительных корня. Обе области значения η , где $Z > 0$, дают одинаковые результаты в силу симметрии $Z(\eta)$, и вместо (16) получим третье решение:

$$\eta = \rho dn(pz, k), \quad \rho^2 = -\frac{8\beta\lambda g_1}{\chi^2 c(2 - k^2)}, \quad p^2 = \frac{\beta g_1}{\chi(2 - k^2)},$$

$$k^2 = \frac{2\sqrt{1 - cg_0/2g_1^2}}{1 + \sqrt{1 - cg_0/2g_1^2}}. \quad (22)$$

Это решение качественно отличается от (16) и (19), поскольку $dnz > 0$, в то время, как snz и cnz периодически меняют знак с изменением z . В случае магнетиков, в которых η имеет смысл намагниченности, такая несоразмерная фаза будет магнитной. Условие (10) после подстановки (22) принимает вид

$$g_1 = \frac{15}{10 + (2 - 3c)u_2},$$

$$u_2 = \frac{2(23 - 23k^2 + 8^4)E(k) - 23(1 - k^2)(2 - k^2)K(k)}{(2 - k^2)[(2 - k^2)E(k) - 2(1 - k^2)K(k)]}. \quad (23)$$

Решение (22) с учетом (23) отвечает равновесному состоянию. Температурная эволюция пространственного распределения параметра $\eta = \rho dn(pz, k)$ в несоразмерной фазе представлена на рис. 3.

Для определения температурной зависимости магнитной восприимчивости в термодинамический потенциал должен быть добавлен член $H_\eta \eta$, где H_η — внешнее магнитное поле. В парамагнитной и соразмерной фазах $\eta'(x) = 0$ и, следовательно, для определения температурной зависимости магнитной восприимчивости необходимо исходить из термодинамического потенциала

$$\Phi = \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 - \eta H_\eta.$$

Равновесное значение параметра порядка при $H \neq 0$ определим минимизацией Φ относительно η

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = \alpha\eta_0 + \beta\eta^3 - H = 0.$$

Из этого уравнения следует, что

$$\frac{\partial \eta_0}{\partial H} = \frac{1}{\alpha + 3\beta\eta_0^2}$$

и, следовательно,

$$\chi = \begin{cases} \alpha^{-1} & \text{при } T < T_k \\ -(2\alpha)^{-1} & \text{при } T > T_k. \end{cases}$$

При $\eta'(x) \neq 0$ решение уравнения (8) ищем в виде

$$Z(\eta) = \frac{\chi}{8\lambda}c\eta^4 + a_3\eta^3 + \frac{\beta}{\chi}g_1\eta^2 + a_1\eta + \frac{\beta^2\lambda}{\chi^3}g_0. \quad (24)$$

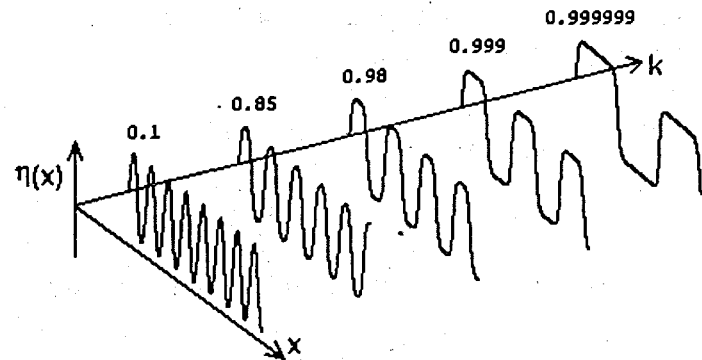


Рис. 1. Температурная эволюция пространственного распределения параметра порядка $\eta = \rho sn(pz, k)$ в несоразмерной фазе

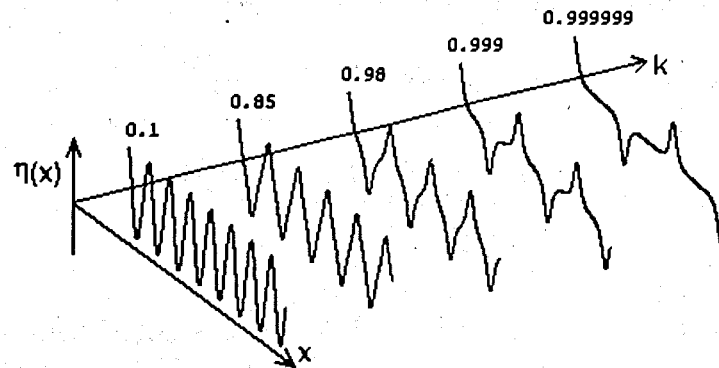


Рис. 2. Температурная эволюция пространственного распределения параметра порядка $\eta = \rho sn(pz, k)$ в несоразмерной фазе

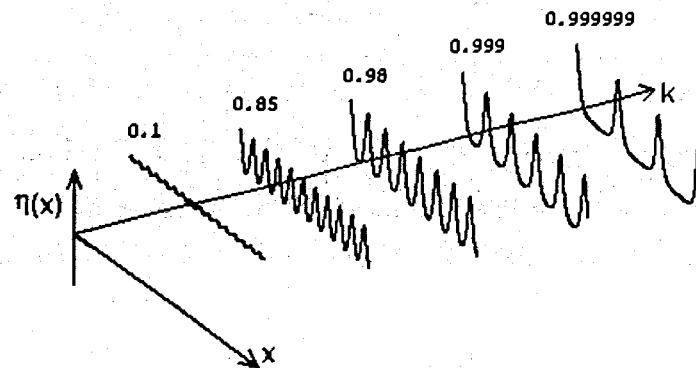


Рис. 3. Температурная эволюция пространственного распределения параметра порядка $\eta = \rho dn(pz, k)$ в несоразмерной фазе

Рассмотрим случай $a_3 = 0$. Непосредственной подстановкой (24) в (13) можно показать, что

$$a_1 = \frac{2\chi H_\eta}{\beta\lambda(g_1 - 5)}, \quad g_0 = 5(5g_1 - g_1^2 - \bar{\alpha}),$$

$$\Phi = \frac{\beta^3\lambda^2}{2\chi^4}g_0(2g_1 - 5) - \frac{\chi^2 H_\eta^2}{2\beta^2\lambda(g_1 - 5)}. \quad (25)$$

Решение для случаев при $\chi < 0$ и при $\chi > 0$ можно записать в виде [10]

$$\eta = \frac{m + \rho \operatorname{sn}(pz, k)}{1 + l \operatorname{sn}(pz, k)}. \quad (26)$$

Входящие сюда величины выразим через g_1 , k и l :

$$m = (1 + k^2 - 2l^2)l\sqrt{\frac{-5\beta\lambda g_1}{\chi^2 N}},$$

$$\rho = (2k^2 - l^2 - k^2 l^2)\sqrt{\frac{-5\beta\lambda g_1}{\chi^2 N}},$$

$$p^2 = \frac{2\beta g_1(1 - l^2)(l^2 - k^2)}{\chi N}, \quad (27)$$

где $N = 2(1 + k^2)(k^2 + l^2) + l^2(1 - 10k^2 + k^4)$. Коэффициенты a_1 и g_0 выражаются через g_1 , k и l ; вместо a_1 пишем H_η согласно (25):

$$H_\eta = \frac{|\beta|^{3/2} \lambda^{3/2}}{|\chi|^3} \bar{H}_\eta,$$

$$\bar{H}_\eta = 2\sqrt{5}N^{-3/2}l(k^2 - l^4)(1 - k^2)^2 g_1^{3/2}(5 - g_1),$$

$$g_0 = \frac{5g_1^2}{2N^2}[16k^6 - 4l^2(1 + k^2)(k^2 + l^4)(1 + 6k^2 + k^4) + l^2(1 + 28k^2 + 38k^4 + 28k^6 + k^8) + 16k^2 l^8]. \quad (28)$$

Здесь учтено, что в данном случае $\beta < 0$. Среднее значение параметра порядка

$$\bar{\eta} = \frac{1}{d} \int_0^d \eta(z) dz = \frac{\rho}{l} \left[1 - \frac{2(1 - l^2)(\kappa^2 - l^2) \Pi(-l^2, \kappa)}{(2\kappa^2 - l^2 - \kappa^2 l^2) K(\kappa)} \right], \quad (29)$$

где $\Pi(-l^2, \kappa)$ — полный эллиптический интеграл третьего рода.

Вычислим отсюда линейную восприимчивость $\chi(\alpha) = \lim_{H_\eta \rightarrow 0} (d\bar{\eta}/dH_\eta)$. Это легко сделать при $\chi > 0$, когда нужно перейти к пределу $l \rightarrow 0$ в (28) и (29). Это выражение совместно с (18) определяет зависимость $\chi = \chi(\alpha)$ в виде

$$\chi(\alpha) = \frac{\chi^2(1 + k^2)}{\beta^2 \lambda g_1(5 - g_1)(1 - k^2)^2} \left[\frac{2E(k)}{K(k)} - 1 + k^2 \right]. \quad (30)$$

Восприимчивость $\chi(\alpha)$ испытывает излом при переходе из исходной фазы в несоразмерную и расходится $\sim 1/2(\alpha - \alpha_c)$ при приближении к переходу в соразмерную фазу. Аналогичная зависимость $\chi = \chi(T)$ имеет место для несоразмерной фазы, описываемой решением $\eta = \operatorname{cn}(px, k)$.

В случае $\chi < 0$ для температурной зависимости магнитной восприимчивости в несоразмерной фазе получаем

$$\chi(\alpha) = \frac{\chi^2(2 - \kappa^2)}{8\beta^2 \lambda \kappa^2(1 - \kappa^2) K(\kappa)^2 g_1(5 - g_1)} \times$$

$$\times \left\{ \frac{5\pi^2(2 - \kappa^2)^2(35 - 2u_3)}{75\kappa^2 + (2 - \kappa^2)[5(2 - \kappa^2)^2 - 2(6 - 6\kappa^2 + \kappa^4)g_1]u_3} + \frac{8(1 - \kappa^2)}{\kappa^2} K(\kappa)[(2 - \kappa^2)K(\kappa) - 2E(\kappa)] \right\}, \quad (31)$$

где $u_3 = du_3/d\kappa^2$, причем величина κ определяется выражением (23). Совместно с выражениями (22), (23) выражение (31) определяет зависимость $\chi = \chi(\alpha)$. Расходимость χ при $T \rightarrow T_I$ нетипичная и связана с особенностью точки $\alpha = \alpha_I$ при $c = 4/5$. В общем случае восприимчивость испытывает скачок при переходе из несоразмерной в соразмерную фазу. При приближении к переходу в исходную фазу восприимчивость расходится $\sim \pi^2/((\alpha_p - \alpha)[\ln(\alpha_p - \alpha)]^2)$.

Определение симметрии несоизмерной фазы

Возникновение магнитной структуры (ферро- или антиферромагнитной) всегда связано со сравнительно слабыми взаимодействиями [11]. Поэтому кристаллографическая структура магнитного тела представляет собой небольшое искажение по сравнению со структурой немагнитной фазы, из которой магнитная фаза обычно возникает при понижении температуры. О совокупности атомов в кристаллической решетке, обладающих одинаковыми значениями средних (по времени) магнитных моментов μ атомов (ионов), говорят, как о магнитной подрешетке. Очевидно, что антиферромагнетик содержит по крайней мере две подрешетки со взаимно антипараллельными и равными по величине значениями μ [11].

Построение магнитных классов и магнитных пространственных групп симметрии (симметрия распределения токов) базируется на знании пространственной группы симметрии кристалла (симметрия распределения зарядов) [9]. Аналогично можно построить суперпространственные группы симметрии несоизмеримой сверхструктуры путем расширения соответствующих суперпространственных магнитных групп несоизмеримой магнитной структуры. С этой целью сначала построим суперпространственную группу симметрии несоизмерной фазы D_{4h}^{17} , связанной с вектором модуляции $\vec{q} = (0, 0, k_s)$. Необходимо подчеркнуть, что построенная таким образом группа описывает симметрию распределения зарядов в несоизмерной фазе. В отличие от периодических структур, в несоизмерных сверхструктурах из-за модулированных искажений положения атомов определяются выражением [12]

$$\vec{r}(\vec{n}, j) = \vec{n}_j + \vec{n} + A f[\vec{q} \cdot (\vec{r}_j + \vec{n}) + \Psi_j], \quad (32)$$

где $\vec{n} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i$, $(n_1, n_2, n_3) \in Z$ -множеству целых чисел. Векторы $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ являются основными векторами решетки исходной фазы, \vec{r}_j - радиус-вектор, определяющий положения j атома в элементарной ячейке исходной фазы. $f(\Psi) = f(\Psi + 2\pi)$ является

функцией модуляции, A - амплитуда модуляции. Вектор обратной решетки $\vec{q} = \alpha \vec{b}_1 + \beta \vec{b}_2 + \gamma \vec{b}_3$ является вектором модуляции несоизмерной фазы, где $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ - базисные векторы обратной решетки исходной фазы. Для несоизмеримости сверхструктуры необходимо и достаточно, чтобы по крайней мере одно из чисел α, β, γ являлось иррациональным числом. Очевидно, что в обычном смысле система в трехмерном пространстве кристаллографической пространственной группой симметрии не обладает. Однако положения атомов инвариантны по отношению следующих преобразований симметрии:

$$\begin{aligned} 1. \quad & \Psi_j \Rightarrow \Psi_j + 2\pi n; \\ 2. \quad & \vec{n} \Rightarrow \vec{n} + \vec{m}, \quad \Psi_j \Rightarrow \Psi_j - \vec{q} \cdot \vec{m} \end{aligned} \quad (33)$$

для произвольного вектора исходной решетки.

Следовательно, симметрия несоизмерных фаз описывается с помощью дискретных подгрупп группы Галилея $IG(n)$. При этом несоизмерная фаза рассматривается как искаженная структура исходной фазы. Знание термодинамического потенциала, описывающего последовательность фазовых переходов исходная-несоизмерная-соразмерная фаза, позволяет определить суперпространственную группу симметрии несоизмерной фазы. А именно, знание неприводимого представления $D^* \vec{k}$ пространственной группы G_0 позволяет определить трансформационные свойства параметра порядка. При этом термодинамический потенциал в соответствии с условием инвариантности зависит от целого рационального базиса инвариантов неприводимого представления $D^* \vec{k}$. Знание матричной группы (L- группы) неприводимого представления позволяет определить суперпространственную группу симметрии несоизмерной фазы [13, 14].

Пусть G_0 - пространственная группа исходной фазы, и $D^* \vec{k}$ является неприводимым представлением группы G_0 , соответствующей волновому вектору \vec{k} . Допустим, что звезда вектора \vec{k} со-

стоит из лучей $\vec{k} = \{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n\}$. Пусть $Q_{\epsilon j}$ - базисные функции неприводимого представления $D_0^{\epsilon \vec{k}}$, где $\epsilon = 1, \dots, n_j$, $j = 1, \dots, p$ и p - размерность малого представления. Можно показать, что в соответствии с условием инвариантности термодинамического потенциала элементы симметрии несоизмерной фазы определяются решением уравнения

$$Q_{\eta i} = \exp(i \vec{q}_\eta \vec{v}) \sum_{\epsilon j} D_0(\vec{k}, \{R | t\})_{\eta \epsilon i j} Q_{\eta j}, \quad (34)$$

где $\eta = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, p$, и $D_0(\vec{k}, \{R | t\})$ - матрицы неприводимого представления, соответствующие элементам группы G_0 . В элементах симметрии суперпространственной группы трансляции фазы определяются посредством d -мерного вектора \vec{v} . В (30) введение скалярного произведения $\vec{q}_\eta \cdot \vec{v}$ в аргументе экспоненты связано с тем, что изменения d -различных фаз позволяют расширить симметрию пространственной группы исходной фазы до симметрии суперпространственной группы таким образом, что термодинамический потенциал системы остается инвариантным. Используя (34), можно показать, что элементы суперпространственной группы удовлетворяют правилу умножения

$$\{R_2 | \vec{t}_2, v_2\} \{R_1 | \vec{t}_1, \vec{v}_1\} = \{R_2 R_1 | R_2 \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \bar{R}_I(R_2) \vec{v}_1 + \vec{v}_2\}, \quad (35)$$

где $\bar{R}_I(R)$ является обратной к $R_I(R)$ $d \times d$ - матрицей и удовлетворяет соотношению

$$R_I(R) \vec{q}_i = \vec{q}_\eta \text{ если } R \vec{k}_i = \vec{k}_\eta. \quad (36)$$

Уравнения (33) и (34) позволяют определить суперпространственную группу симметрии несоизмерной фазы. Определим суперпространственную группу симметрии несоизмерной сверхструктуры, характеризуемую волновым вектором модуляции $\vec{k} =$

$(0, 0, k_s)$, причем симметрией системы в исходной фазе является пространственная группа D_{4h}^{17} .

Следовательно, элементы суперпространственной группы несоизмерной фазы согласно (33) определяются уравнением

$$\exp(2\pi i v) D^* \vec{k} (\vec{q}, \{R | \vec{t}\}) Q = Q. \quad (37)$$

Рассмотрим следующие образующие элементы группы D_{4h}^{17} :

$$\{E | -1/2, 1/2, 1/2\}, \quad \{E | 1/2, -1/2, 1/2\}, \quad \{E | 1/2, 1/2, -1/2\}, \\ \{2C_4, 2C_2'', 2S_4, 2\sigma_d\}, \quad \{C_2, 2C_2', I, \sigma_h, 2\sigma_v\}. \quad (38)$$

В неприводимом представлении $D_0^{\vec{k}}$ этим элементам соответствуют матрицы

$$\left(\exp(i \frac{k_s}{2})\right), \left(\exp(-i \frac{k_s}{2})\right), (-1), (-1)$$

соответственно. Согласно с решением уравнения (37) определяются соответствующие фазы v и следовательно, соответствующие элементы суперпространственной группы симметрии несоизмерной фазы, которые оставляют инвариантной плотность распределения зарядов в этой фазе. Они имеют вид

$$\{E | \vec{a}_1, -\frac{k_s}{2}\}, \quad \{E | \vec{a}_2, -\frac{k_s}{2}\}, \quad \{E | \vec{a}_3, -\frac{k_s}{2}\}, \\ \{E | \vec{0}, 1\}, \quad \{C_4 | \vec{0}, 1/2\}, \quad \{[I | \vec{0}, 0\}. \quad (39)$$

Необходимо подчеркнуть, что полученный результат показывает, что точечные группы симметрии исходной фазы и несоизмерной фазы совпадают. Обсудим возможные магнитные группы симметрии парамагнитной фазы и определим симметрию в соразмерной антиферромагнитной фазе кристалла. Согласно нейтронографическим данным при $x \in [0,00; 0,02]$ соразмерная фаза $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ является антиферромагнитной

[1]. Следовательно, последовательность магнитных фазовых переходов парамагнитная-несоразмерная-соразмерная фаза не может быть связана неприводимым представлением B_{1g} пространственной группы D_{4h}^{17} , соответствующей центру зоны Бриллюэна. Следуя [11], определим возможные магнитные группы симметрии парамагнитной и соразмерной антиферромагнитной фаз кристалла.

Первому типу магнитной пространственной группы парамагнитной фазы соответствует кристаллографическая группа симметрии D_{4h}^{17} . В этом случае, используя теоретико-групповые методы определения симметрии соразмерной фазы (критерий цепочки [12]), можно показать, что пространственной группой симметрии низкосимметричной фазы является группа D_{2h}^{25} . Трансляционная группа этой фазы определяется рациональной частью величины k_s . Второму типу магнитной пространственной группы парамагнитной фазы соответствует группа

$$G = D_{4h}^{17} + RD_{4h}^{17}. \quad (40)$$

Можно показать, что в этом случае симметрия соразмерной фазы определяется группой G .

Результаты полного анализа показывают, что в соединениях $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ магнитный фазовый переход в соразмерную антиферромагнитную фазу связан одномерным неприводимым представлением $D^* \vec{k}$ пространственной группы D_{4h}^{17} и трансляционная симметрия соразмерной фазы однозначно определяется рациональной частью волнового вектора модуляции структуры. Так как волновой вектор модуляции зависит от концентрации допирующего вещества, с изменением x в $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ происходит изменение трансляционной симметрии соразмерной фазы. Так, при $x = 0$ в UPd_2Ge_2 наблюдается антиферромагнитная структура с учетверенной решеткой, тогда как при $x = 0,02$ магнитная решетка антиферромагнитной соразмерной фазы $U(Pd_{0,98}Fe_{0,02})_2Ge_2$ оказывается удвоенной.

Ренормгрупповой анализ фазового перехода из парамагнитной фазы в несоразмерную фазу в кристаллах с переменным составом

Изучение фазовых переходов в соединениях с переменным составом, описываемых в рамках данного класса универсальности, показывает, что вдали от точки Лифшица при фазовом переходе критические индексы с изменением концентрации допируемого вещества меняются [5]. Предположим, что это связано, наряду со взаимодействием флуктуаций параметра порядка, также с влиянием распределения дефектов, вносимым допируемым веществом, на движения статических волн зарядовой плотности. Следовательно, предположим, что изменяется спектр возбуждений в системе.

Действительно, рассмотрим термодинамический потенциал в виде

$$\Phi(x) = \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{2}\eta^4 + \dots + \frac{\delta}{2}(\eta')^2 + \frac{\lambda}{2}(\eta'')^2 + \dots \quad (41)$$

Экстремум функционала определяется уравнением Эйлера

$$\lambda\eta^{IV} - \delta\eta'' + \dots = -\alpha\eta - \beta\eta^3 - \gamma\eta^5 - \dots \quad (42)$$

Уравнение (42) можно записать в виде

$$\lambda\eta^{III} - \delta\eta' + \dots = -\int_0^x k(x-x')F(\eta(x'))dx', \quad (43)$$

где $F(\eta) = \alpha\eta + \beta\eta^3 + \gamma\eta^5 + \dots$

При $K(x-x') = 1$ простым дифференцированием можно показать, что уравнения (41) и (43) совпадают. В общем случае функция $K(x-x')$ описывает влияние нелокальных взаимодействий на движения статических смещений волн зарядовой плотности в среде.

Определим $K(x-x')$ на фрактальном множестве Кантора [15]

$$K(x-x') = \frac{1}{x(\lambda\xi)^N} \sum_{m=1}^{2^N} \theta(x_m^{(N)} < x < x_{m+1}^{(N)}). \quad (44)$$

Здесь $\xi (\xi \leq 1/2)$ - параметр подобия, $t_n^{(N)}$ и $(\lambda\xi)^N x$ являются плотностями оставшихся состояний [15] на N этапе построения множества Кантора, $\theta(x)$ - ступенчатая функция.

Вводя обозначения

$$I(x) = \int_0^z K(x-x')F(x')dx' \quad (45)$$

для изображения функции $I(x)$, можно получить

$$I(z) = \Phi(p) = \frac{F(p)}{\xi^N px} [1 - \exp(-xp\xi^N)] Q_N(z), \quad (46)$$

где введено обозначение

$$Q_N(x) = \frac{1}{2^N} \prod_{n=0}^{N-1} [1 + \exp(-z\xi^N)], \quad z = px(1 - \xi). \quad (47)$$

Из выражения (47) можно получить для $Q_N(x)$ рекуррентное соотношение

$$Q_N\left(\frac{z}{\xi}\right) = \frac{1}{2} \left[1 + \exp\left(-\frac{z}{\xi}\right)\right] Q_{N-1}(z). \quad (48)$$

В неподвижной точке

$$Q^*\left(\frac{z}{\xi}\right) = \frac{1}{2} Q^*(z), \quad (49)$$

решение последнего уравнения имеет вид

$$Q^*(z) = A_\nu z^{-\nu}. \quad (50)$$

Следовательно, функция $\Phi(p)$ принимает вид

$$\Phi(p) = A_\nu (px)^{-\nu} (1 - \xi)^{-\nu} F(p). \quad (51)$$

Выражение (51) соответствует представлению $I(t)$ в форме дробного интеграла

$$I(x) = A_\nu (1 - \xi)^{-\nu} x^{-\nu} \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^z (x-x')^{\nu-1} F(x') dx' =$$

$$= A_\nu x^{-\nu} (1 - \xi)^{-\nu} D^{-\nu} F. \quad (52)$$

Следовательно, используя коммутативные свойства дробных производных [16], уравнение (42) можно представить в виде

$$\left(\lambda \frac{\partial^{3+\nu}}{\partial x^{3+\nu}} - \delta \frac{\partial^{1+\nu}}{\partial x^{1+\nu}} + \dots\right) \eta(x) = -F(\eta(x)). \quad (53)$$

Уравнение (53) описывает движение статических волн зарядовой плотности в среде. Следовательно, в такой изотропной среде спектр будет содержать нецелые степени импульса. Поэтому для ренормгруппового исследования фазового перехода из парамагнитной в антиферромагнитную фазу эффективный гамильтониан [17, 18] можно представить в виде

$$H = -\frac{1}{2} \int v(q) \sigma_q \sigma_{-q} - u \int_q \int_{q'} \int_{q''} \sigma_q \sigma_{q'} \sigma_{q''} \sigma_{-q-q'-q''}, \quad (54)$$

где $v(q) = \gamma + q^{1+\nu}$.

Отметим, что распределения неоднородностей, характеризующих размерностью множества Кантора, могут зависеть от температуры. Дело в том, что отличительная особенность монофрактального множества Кантора состоит в том, что отрезки, полученные на каждом этапе деления исходного фрагмента, имеют одинаковые длины и реализуются с одинаковой вероятностью. Если предположить, что длины отрезков становятся разными, то множества Кантора приобретают двухмасштабный характер, и при заданных длинах отрезков они определяют единственное значение фрактальной размерности. Неоднородность в распределении масштабов лишь уменьшает фрактальную размерность, оставляя ее единственной и не приводя к трансформации монофрактала в мультифрактал. Таким образом, изменение масштаба образования множества Кантора, обусловленное, например, понижением температуры может приводить к температурной зависимости фрактальной размерности.

Для вывода уравнения ренормгруппы статистическую сумму запишем в виде [17]

$$Z = \int \left(\prod_q d^n \sigma_q\right) (e^{H[\sigma_q]}). \quad (55)$$

Сначала производим интегрирования по полям σ_q с $\Lambda/q < |q| < \Lambda$, где $b > 1$.

Обозначим

$$e^{H_1} = \int \left(\prod_{\Lambda/q < |q| < \Lambda} d^n \sigma_q \right) e^{H(q)} \quad (56)$$

и, следовательно,

$$Z = \int \left(\prod_{|q| < \Lambda/b} d^4 \sigma_q \right) e^{H_1}, \quad (57)$$

где функционал H_1 зависит от переменных σ_q с $|q| < \Lambda/b$. Условие инвариантности требует произвести масштабные преобразования импульсов \vec{q} и полей σ_q

$$\vec{q} \Rightarrow \vec{q}' = b \vec{q}; \quad \sigma_{\vec{q}}^a \Rightarrow \sigma'_b \vec{q}' = \sigma'_{\vec{q}'} = \xi^{-1} \sigma_{\vec{q}}. \quad (58)$$

Предположим, что ренормализационная группа имеет неподвижную точку. Тогда получаем

$$\begin{aligned} r' &= \xi^2 b^{-d} [r + 4(n+2)uA(r) + \dots], \\ u' &= b^{-3d} \xi^4 [u - 4(n+8)u^2 C(r) + \dots]. \end{aligned} \quad (59)$$

В (59) введены обозначения

$$A(r) = \int_{\vec{q}} v^{-1}(\vec{q}), \quad C(r) = \int_{\vec{q}} v^{-2}(q), \quad (60)$$

где $\int_{\vec{q}}$ обозначает интегрирование по импульсам в области

$\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$ в d -мерном пространстве. Параметр ξ определим так, чтобы коэффициент перед q в $v(q) = r + q^\gamma$ равнялся единице. Это дает $\xi^2 b^{-d} b^{-\gamma} = 1 \Rightarrow \xi^2 b^{-d} = b^\gamma$, где $\gamma = 1 + \nu$.

Следовательно,

$$b^{\xi^d} \xi^4 = b^{-d+2\gamma}.$$

Таким образом, уравнения ренормгруппы представляются выражениями

$$r' = b^\gamma [r + 4(n+2)uA(r) + \dots],$$

$$u' = b^{-d+2\gamma} [u - 4(n+8)u^2 C(r) + \dots]. \quad (61)$$

Предположим, что $\gamma = \frac{3}{2} + \epsilon$, где $\epsilon \in (0, 1/2)$ в пространстве с размерностью $d = 3$, получим

$$\begin{aligned} r' &= b^{3/2+\epsilon} [r + 4(n+2)uA(r) + \dots], \\ u' &= b^{2\epsilon} [u - 4(n+8)u^2 C(r) + \dots]. \end{aligned} \quad (62)$$

Здесь $C(r) \cong K_d \ln b$ и в неподвижной точке получаем

$$u^* = \frac{2\epsilon}{4(n+8)K_d}.$$

Учитывая, что $A(r) \simeq -rC(0)$ получаем

$$r' = b^{3/2+\epsilon} [r - 4(n+2)urC(0) + \dots]. \quad (63)$$

Линеаризация уравнения (63) в неподвижной точке u^* дает

$$r' = b^{1/\nu} \Delta r, \quad (64)$$

что позволяет определить критический показатель

$$\nu = \left(\frac{3}{2} + \epsilon - \frac{2(n+2)\epsilon}{n+8} \right)^{-1}. \quad (65)$$

В данном случае согласно соотношению подобия критический индекс магнитной восприимчивости $\gamma = 2\nu$.

В отличие от традиционного подхода, где $\epsilon = 4 - d$ [17, 18], в данном случае ϵ характеризует размерность пространства, созданную геометрией распределения неоднородностей в структуре кристалла.

Заключение

В данной работе впервые представлена теория последовательности магнитных фазовых переходов в соединениях с переменным составом. На основе симметричных аргументов построен функционал термодинамического потенциала с коэффициентами разложения, зависящими от концентрации атомов замещения. Развитая теория позволяет описать физические свойства соединений с переменным составом в области последовательности магнитных фазовых переходов при произвольных значениях x на основе единого функционала термодинамического потенциала. Это позволяет понять природу взаимосвязи физических свойств структур с переменным составом при различных x .

Симметричный анализ показывает, что фазовая диаграмма структур типа $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$, в принципе, содержит последовательность фазовых переходов парамагнитная-несоразмерная (AF- snz -модуляция)- несоразмерная (AF- cnz -модуляция) - несоразмерная (FM- dnz -модуляция) - соразмерная фаза.

Среднее значение параметра порядка в фазах с $sn(px, k)$ и $cn(px, k)$ -модуляцией равно нулю, что свидетельствует об антиферромагнитном несоизмеримом упорядочении магнитных моментов в структуре. Фаза с $dn(px, k)$ -модуляцией вследствие $dnz > 0$ является гофрированной (rippled). Среднее значение параметра порядка в фазе с $dn(px, k)$ -модуляцией отлично от нуля. В несоизмеримых фазах несоизмеримая часть волнового вектора модуляции $q = 2\pi/d$ вследствие $d \sim |\ln(1 - \kappa^2)| \rightarrow \infty$, стремится к нулю. Симметричный анализ также показывает, что температурная ширина области существования несоразмерной фазы является функцией концентрации допирующего вещества. С увеличением концентрации допирующего вещества значение k_s уменьшается. При k_s , стремящемся к нулю, антиферромагнитный фазовый переход в соразмерную фазу невозможен. Следовательно, фазовая диаграмма в таком случае ($k_s \rightarrow 0$ и $x \rightarrow 1$) должна состоять только из парамагнитной фазы.

Необходимо отметить, что в отличие от фазы с $sn(px, k)$ -модуляцией фазовый переход из фазы с cnz -модуляцией в соразмерную фазу имеет особенность. Этот переход является переходом первого рода, и это связано с тем, что функция cnz в отличие от snz близка к нулю на большей части своего периода при приближении к точке фазового перехода из несоразмерной в соразмерную фазу.

Поэтому в случае решения типа $cn(z, k)$ домены с соразмерной структурой, где $\eta = \eta_c \neq 0$, не образуются даже в зародышевом состоянии, непрерывный переход в соразмерную фазу невозможен.

Симметричный анализ показывает, что в парамагнитной и соразмерной фазах и в солитонном режиме несоизмеримых фаз $\chi(T) \sim (T - T_k)^{-1}$, где T_k - соответствующая критическая точка.

Структуру неоднородности в системе можно задать фрактальным множеством Кантора. В этом случае разложение спектра возбуждения содержит нецелые степени импульса, и следовательно неоднородность структуры характеризуется размерностью фрактального множества Кантора. С учетом неоднородности структуры, задаваемой фрактальным множеством Кантора, построенная ренормгрупповая теория фазового перехода из парамагнитной в соразмерную фазу позволила получить зависимость критических показателей от фрактальной размерности множества Кантора. Таким образом, с изменением x критические показатели в структурах с переменным составом изменяются. Для сравнения подчеркнем, что для структур с переменным составом значения критических показателей, определяемые теорией Ландау, неизменны. Так, с изменением x меняется значение константы Кюри - Вейсса. Ренормгрупповой анализ показывает, что температурная зависимость магнитной восприимчивости ведет себя как $\sim (T - T_l)^{-\gamma}$, где $\gamma = 2\nu$.

Знание волнового вектора модуляции $q = (0, 0, k_s)$ и пространственная группа симметрии D_{4h}^{17} парамагнитной фазы позволили определить элементы симметрии суперпространственной группы несоразмерной фазы и показать, что точечные группы симметрии исходной и несоразмерной фаз совпадают. Определены возможные

типы магнитных пространственных групп структур с переменным составом типа $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$. Используя "критерий цепочки", предсказаны возможные группы симметрии соответствующих соразмерных фаз. В частности, показано, что в UPd_2Ge_2 в соразмерной фазе реализуется антиферромагнитная структура с учетверенной магнитной решеткой, тогда как в $U(Pd_{0,98}Fe_{0,02})_2Ge_2$ магнитная решетка оказывается удвоенной.

В нейтронографических экспериментах [1] при атмосферном давлении и при $x = 0$ и $x = 0,02$ в $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ наблюдается последовательность магнитных фазовых переходов типа парамагнитная-несоразмерная (антиферромагнитная с $sn(px, k)$ -модуляцией) - несоразмерная (антиферромагнитная с $cn(px, k)$ -модуляцией) - соразмерная (антиферромагнитная) фаза. Причем при $x = 0$ и $x = 0,02$ соответствующие соразмерные фазы имеют учетверенную и удвоенную магнитные решетки, соответственно. Переход из несоразмерной в соразмерную фазу имеет размытый характер, что, по-видимому, связано с особенностью фазы с $cn(px, k)$ -модуляцией. При фазовом переходе между несоизмеримыми фазами температурная зависимость магнитной восприимчивости терпит разрыв, а значение волнового вектора модуляции проявляет излом. В целом температурная зависимость магнитной восприимчивости в несоразмерной фазе следует закону Кюри - Вейсса. Экспериментальные результаты показывают [5], что в парамагнитной фазе вблизи перехода из парамагнитной в несоразмерную фазу магнитная восприимчивость проявляет степенную зависимость от температуры и с увеличением концентрации допируемого вещества значение константы Кюри изменяется. В целом экспериментальная температурная зависимость $\chi = \chi(T)$ в области последовательности магнитных фазовых переходов согласуется с теоретическими результатами представленной работы.

К сожалению, измерение $\chi = \chi(T)$ не позволяет достаточно точно определить значения константы Кюри - Вейсса и критического показателя γ . Оценки показывают, что значение γ близко к единице, однако с изменением x значение γ изменяется. Сравнение

экспериментальных результатов при $x = 0$ и $x = 0,02$ показывает, что в соединениях $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ с увеличением x температурная ширина существования несоразмерной фазы уменьшается и значение волнового вектора модуляции уменьшается.

Для однозначного сравнения теоретических предсказаний данной работы с экспериментальными данными $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$ требуется проведение претенциозных экспериментов по изучению температурных зависимостей магнитной восприимчивости, несоразмерной части волнового вектора и температурной области существования несоизмеримой фазы при различных x . Изучение влияния давления позволило бы выявить ферромагнитную несоизмеримую фазу в этих соединениях.

Замещение Pd атомами Fe приводит к уменьшению постоянных решетки и следовательно объема элементарной ячейки. В этом смысле замещение Pd атомами, имеющими большой ионный радиус, позволило бы исследовать отклики системы на механическое расширение. Проведение экспериментов по неупругому рассеянию, по определению спектра возбуждений и значения критического показателя магнитной восприимчивости позволило бы определить физическую природу неоднородностей и механизмы фазовых переходов в этих соединениях.

Авторы выражают благодарность проф. Н.М.Плакиде, проф. А.П.Леванюку А.М. Балагурову, В.В.Сиколенко и В.Ю.Помякушину за обсуждение.

Литература

1. А.М. Балагуров, и др. // Писма в ЖЭТФ. 1997. Т. 66. В. 9. С. 615.
2. H. Ptasiwicz et al. // J. Phys. F Metal Phys. 1981. V. 11. P. 1225.
3. H. M. Duh et al. // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 4294.
4. G. Andre et al. // Solid State Commun. 1996. V. 97. N 11. P. 923.
5. H.M. Duh et al. // Jour. Magn. And Magn. Mater. 1996. V. 153. P. 86.
6. О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 367 с.
7. Г.Я. Любарский. Теория групп и ее применение в физике. М.: Наука, 1958.
8. Г. Штрайтвольф. Теория групп в физике твердого тела. М.: Мир, 1971. 257 с.
9. А. Пуле, Ж.-П. Матье. Колебательные спектры и симметрия кристаллов. М. Мир, 1973. 437 с.
10. В.А. Головка. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 2. С. 182.
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. Т. 8. С. 620.
12. T. Janssen, A. Janner. // Advances in Physics. 1987. V. 36. N 5. P. 519.
13. J. M. Perez -Mato et al. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N. 3. P. 1534.
14. Б.Р. Гаджиев и др. // ФТТ. 1991. Т. 33. N 2. С. 643.
15. Р.Р. Нигматулин. // Теорет. и мат. физика. 1992. Т. 90. N 3. С. 354.
16. С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их применения. Минск.: Наука и техника, 1987. 736 с.
17. К. Вильсон, Дж. Когут. Ренормализационная группа и ϵ - разложение. М.: Мир, 1975.
18. ed. by C. Lombar and M.S. Green. Phase transitions and critical phenomena. London.: Academic, 1976. V. 6.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 сентября 1998 года.

Аксенов В.Л., Гаджиев Б.Р.

P17-98-256

Последовательность магнитных фазовых переходов в кристаллах с переменным составом $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$

Построена феноменологическая теория последовательности магнитных фазовых переходов типа парамагнитная-несоразмерная-соразмерная фаза для кристаллов с переменным составом $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$. Показано, что волновой вектор модуляции является функцией температуры и концентрации допирующего вещества, а также что температурная область существования несоразмерной фазы зависит от концентрации допирующего вещества. Определены магнитные группы симметрии соразмерной фазы, суперпространственная группа симметрий несоразмерной фазы и фазовая диаграмма. Получены пространственные зависимости параметров порядка в антиферромагнитных и магнитных фазах и показано, что иррациональная часть волнового вектора модуляции в солитонном режиме несоразмерной фазы вблизи перехода из несоразмерной в соразмерную фазу стремится к нулю. Определены температурные зависимости магнитных восприимчивостей в несоразмерных антиферромагнитной и магнитной фазах. С учетом неоднородности структуры, вносимой допирующим веществом, построена ренормгрупповая теория фазового перехода из парамагнитной в соразмерную фазу. Рассмотрен случай неоднородности структуры, характеризуемой фрактальным множеством Кантора, и получена зависимость критических показателей от фрактальной размерности этого множества. Приведены сравнения полученных теоретических результатов с экспериментальными данными для $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$. Сделан вывод о том, что в этих соединениях наблюдается последовательность переходов типа парамагнитная – несоразмерная (модуляция типа *smz*, антиферромагнитная) – несоразмерная (модуляция типа *smz*, антиферромагнитная) – соразмерная (антиферромагнитная) фаза. Вследствие зависимости волнового вектора модуляции от концентрации допирующего вещества магнитные структуры соразмерной фазы получаются различными. Так, при $x=0,00$ в соразмерной фазе магнитная решетка учетверяется, тогда как при $x=0,02$ – удваивается.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1998

Перевод авторов

Aksenov V.L., Gadjiev B.R.

P17-98-256

The Sequence of Magnetic Phase Transitions in Mixed Crystals $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$

The phenomenological theory of the sequence of magnetic phase transitions of the paramagnetic-incommensurate-commensurate phase type has been developed for the crystals with mixed composition $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$. It is shown that the modulation wave vector is the function of temperature and doping element concentration. It is shown that the temperature region of the incommensurate phase existence depends on the doping element concentration. The magnetic symmetry groups for the commensurate phase and superspace symmetry group for the incommensurate phase were defined. The spatial dependencies of the order parameters in antiferromagnetic phases and in magnetic phase were obtained. It is shown that the irrational part of the modulation wave vector in soliton regime of the incommensurate phase is diminishing to zero close to the transition from the incommensurate to commensurate phase. The temperature dependencies of the magnetic susceptibilities in the incommensurate antiferromagnetic and magnetic phases were defined. Renorm-group theory of phase transition from the paramagnetic to the incommensurate phase has been developed taking into account the inhomogeneities of the structure due to the presence of doping element. The case of structure inhomogeneity characterised by the fractal Cantor set has been considered, and the dependence of the critical exponents on the fractal dimensions of the Cantor set has been obtained. The obtained theoretical results are compared to the experimental data on $U(Pd_{1-x}Fe_x)_2Ge_2$. In conclusion, in this crystals the consequence of phase transitions of the type paramagnetic – incommensurate (with *smz* type of modulation, antiferromagnetic) – incommensurate (with *cmz* type of modulation, antiferromagnetic) – commensurate (antiferromagnetic) phase was observed. Due to the dependence of the modulation wave vector on the concentration of the doping element, the magnetic structures of the commensurate phase are different. For example, at $x=0$, in the commensurate phase the lattice is four times multiplied, while at $x=0.02$, the lattice is doubled.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1998