УДК 537.621.4

МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ

Ю.Д.Заворотнев

Донецкий физико-технический институт АН Украины
Поступило в Редакцию 16 мая 1994 г.

С помощью теоретико-группового анализа найден целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ) тетрагонального кристалла симметрии D_{4h}. На основе ЦРБИ определены возможные конфигурации магнитной подсистемы.

Кристаллы тетрагональной симметрии называют довольно большой интерес в связи с разнообразием различных магнитных состояний и широким спектром фазовых переходов [1,2]. В качестве примера можно привести тетрагональную фазу $RBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, в которой было обнаружено явление сверхпроводимости [3]. Все это делает актуальным вопрос о перечислении возможных магнитных состояний в кристаллах такого типа. Необходимо отметить, что подобная задача недавно была решена для кристаллов треугольной структуры.

1. Вычисление целого рационального базиса инвариантов (ЦРБИ) для центральной точки Бриллюэна

Решение поставленной задачи проведем на примере точечной симметрии группы I_{4h}, которую имеет тетрагональная фаза соединения $RBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Известно [4], что неравновесный потенциал можно представить как целую рациональную функцию однородных относительно компонент параметра порядка полиномов, образующих ЦРБИ. Задача нахождения этого базиса облегчается тем обстоятельством, что рассматриваемые состояния соответствуют нулевому волновому вектору $\mathbf{k} = 0$. Неприводимые вектора для точечной группы D_{4h} легко определяются и имеют вид

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 + \mathbf{s}_4 && (A_{1g}),\\
\mathbf{Q} &= \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 - \mathbf{s}_4 && (B_{2g}),\\
&\left.\begin{aligned}\mathbf{L}_1 &= \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_3 - \mathbf{s}_4\\ \mathbf{L}_2 &= \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_3 + \mathbf{s}_4\end{aligned}\right\} && (E_g),
\end{aligned} \tag{1}$$

где $\mathbf{s}_i$ ($i = 1,2,3,4$) — спин i-го иона элементарной ячейки. Обратное преобразование записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1 &= 0.25(\mathbf{F} + \mathbf{Q} + \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2), \\ \mathbf{s}_2 &= 0.25(\mathbf{F} - \mathbf{Q} + \mathbf{L}_1 - \mathbf{L}_2), \\ \mathbf{s}_3 &= 0.25(\mathbf{F} + \mathbf{Q} - \mathbf{L}_1 - \mathbf{L}_2), \\ \mathbf{s}_4 &= 0.25(\mathbf{F} - \mathbf{Q} - \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2). \end{aligned} \tag{2}$$

Как следует из (1), все неприводимые векторы преобразуются по симметричным представлениям. Очевидно, что ядром гомоморфизма для всех этих неприводимых представлений является подгруппа C_i, состоящая из единичного элемента и инверсии. Следовательно, соответствующей L-группой является $d_4 \otimes \mathrm{SO}^+(3)$. Если в качестве минимальной взять группу вращений в спиновом пространстве, то группа $D_4 \otimes \mathrm{SO}^+(3)$ будет разрешимой [5] и для нее можно построить конечный ряд вложений, т.е. эту группу можно представить в виде вложенных друг в друга нормальных подгрупп [6]

$$D_4 \otimes \mathrm{SO}^+(3) \sqsupset D_2 \otimes \mathrm{SO}^+(3) \sqsupset C_2 \otimes \mathrm{SO}^+(3) \sqsupset \mathrm{SO}^+(3). \tag{3}$$

Полученные фактор-группы записываются следующим образом:

$$A_1 = (E, 4_z); \quad A_2 = (E, 2_x); \quad A_3 = (E, 2_y). \tag{4}$$

Для нахождения ЦРБИ полной группы необходимо найти ЦРБИ минимальной группы, а затем, пользуясь теоремами построения [6] и двигаясь в ряду (3) справа налево, последовательно строить инварианты с помощью фактор-групп. Для группы вращений в спиновом пространстве инвариантами являются квадраты модулей этих векторов, а также их скалярные произведения, т.е. ЦРБИ имеет вид

$$\mathbf{F}^2; \mathbf{Q}^2; \mathbf{L}_1^2; \mathbf{L}_2^2; \mathbf{FQ}; \mathbf{FL}_1; \mathbf{FL}_2; \mathbf{QL}_1; \mathbf{QL}_2; \mathbf{L}_1\mathbf{L}_2. \tag{5}$$

Набор (5) образует базис для подгруппы второго порядка $(E, 2_y)$. Для такой группы нахождение ЦРБИ осуществляется следующим образом [4,6]. Функции из набора (5), которые инвариантны относительно операций симметрии группы второго порядка, входят в ЦРБИ этой группы. Из функций, которые меняют знак при действии неединичного элемента, необходимо образовать все возможные квадратичные произведения. В итоге получаем для группы $D_4 \otimes \mathrm{SO}^+(3)$ ЦРБИ из 32-х инвариантов, которые приведены ниже

$$\begin{gathered} I_1 = \mathbf{F}^2, \quad I_2 = \mathbf{Q}^2, \quad I_3 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2, \quad I_4 = (\mathbf{FQ})^2, \quad I_5 = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)^2, \\ I_6 = (\mathbf{FL}_1)^2 + (\mathbf{FL}_2)^2, \quad I_7 = (\mathbf{QL}_1)^2 + (\mathbf{QL}_2)^2, \quad I_8 = \mathbf{L}_1^4 + \mathbf{L}_2^4, \\ I_9 = (\mathbf{FL}_1)^4 + (\mathbf{FL}_2)^4, \quad I_{10} = (\mathbf{FL}_1)^2(\mathbf{FL}_2)^2, \quad I_{11} = (\mathbf{QL}_1)^4 + (\mathbf{QL}_2)^4, \\ I_{12} = (\mathbf{QL}_1)^2(\mathbf{QL}_2)^2, \quad I_{13} = \mathbf{L}_1^2\mathbf{L}_2^2, \quad I_{14} = (\mathbf{FQ})(\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2), \\ I_{15} = (\mathbf{FL}_1)(\mathbf{QL}_2) + (\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_1), \quad I_{16} = (\mathbf{FL}_1)(\mathbf{QL}_2) + (\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_1), \end{gathered}$$

$$I_{17} = (\mathbf{FL}_1)(\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_1)(\mathbf{QL}_2), \quad I_{18} = (\mathbf{FQ})^2 + \Big((\mathbf{FL}_1)^2 + (\mathbf{FL}_2)^2\Big),$$

$$I_{19} = (\mathbf{FQ})^2\Big((\mathbf{QL}_1)^2 + (\mathbf{QL}_2)^2\Big), \quad I_{20} = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)^2\Big((\mathbf{FL}_1)^2 + (\mathbf{FL}_2)^2\Big),$$

$$I_{21} = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)^2\Big((\mathbf{QL}_1)^2 + (\mathbf{QL}_2)^2\Big), \quad I_{22} = (\mathbf{FL}_1)(\mathbf{FL}_2)(\mathbf{FQ}),$$

$$I_{23} = (\mathbf{FQ})\Big((\mathbf{FL}_1)(\mathbf{QL}_1) + (\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_2)\Big), \quad I_{24} = (\mathbf{FL}_1)(\mathbf{FL}_2)(\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2),$$

$$I_{25} = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)\Big((\mathbf{QL}_1)(\mathbf{FL}_1) + (\mathbf{QL}_2)(\mathbf{FL}_2)\Big), \quad I_{26} = (\mathbf{QL}_1)(\mathbf{QL}_2)(\mathbf{FQ}),$$

$$I_{27} = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)(\mathbf{QL}_1)(\mathbf{QL}_2), \quad I_{28} = (\mathbf{FQ})^2\Big((\mathbf{QL}_1)(\mathbf{FL}_2) + (\mathbf{QL}_2)(\mathbf{FL}_1)\Big),$$

$$I_{29} = (\mathbf{FQ})(\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)\Big((\mathbf{FL}_1)^2 + (\mathbf{FL}_2)^2\Big), \quad I_{30} = (\mathbf{FQ})(\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)\Big((\mathbf{FL}_1)(\mathbf{QL}_2) +$$

$$+ (\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_1)\Big), \quad I_{31} = (\mathbf{FQ})(\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)\Big((\mathbf{QL}_1)^2 + (\mathbf{QL}_2)^2\Big),$$

$$I_{32} = (\mathbf{L}_1\mathbf{L}_2)^2\Big((\mathbf{FL}_1)(\mathbf{QL}_2) + (\mathbf{FL}_2)(\mathbf{QL}_1)\Big). \qquad (6)$$

Необходимо отметить, что найденный ЦРБИ является полным. Мы не будем выделять минимальный ЦРБИ и искать связывающие сизигии, поскольку как было показано в работе [7], выделение минимального ЦРБИ приводит к неоправданному повышению симметрии задачи и появлению дополнительных состояний.

2. Магнитные конфигурации

Рассмотрим возможные «чистые» состояния в тетрагональной системе. Для этого достаточно ограничиться рассмотрением инвариантов $I_1, I_2, I_3, I_5, I_8, I_{13}$.

1) $\mathbf{F} \neq 0, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 = 0.$

Имеет место «чистое» ферромагнитное состояние, определяемое из соотношения

$$\partial\varphi/\partial\mathbf{F} = 2\varphi_1\mathbf{F} = 0, \qquad (7)$$

где $\Phi_i = \partial\Phi/\partial I_i$, Φ — потенциал Ландау, представленный в виде бесконечного ряда по степеням инвариантов I_i. При $\mathbf{F} \neq 0$ требуется выполнение условия $\Phi_1 = 0$. Спины отдельных ионов определяются из равенств $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_2 = \mathbf{s}_3 = \mathbf{s}_4$. Если состояние является состоянием типа «легкая» ось, то симметрия системы не меняется. Если — «легкая» плотность, то симметрия понижается до C_{2v}, причем ось второго порядка по направлению совпадает с вектором $\mathbf{F}$.

2) $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 = \mathbf{F} = 0, \quad \mathbf{Q} \neq 0.$

Получающееся «чистое» состояние определяется из соотношения $\Phi_2 = 0$ и имеет место $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_3 = -\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_4$.

3) $\mathbf{F} = \mathbf{Q} = 0, \quad \mathbf{L}_1 \neq 0, \quad \mathbf{L}_2 \neq 0.$

Рассмотрим следующие случаи.

3.1) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$. Поскольку $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ образуют базис неприводимого представления, то в соответствии с [6] перейдем к полярной системе координат $L_1 = \eta\cos\varphi$, $L_2 = \eta\sin\varphi$. Тогда из условия минимума потенциала получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \partial\Phi/\partial\varphi = \eta^4 \sin 2\varphi \cos 2\varphi \cdot (\Phi_{13} - 2\Phi_8) = 0, \\ \partial\Phi/\partial\eta = \eta\Big[2\Phi_3 + 4\eta^2(1 - 0.5\sin^2 2\varphi)\Phi_8 + 0.25\eta^2 \sin^2 2\varphi\Phi_{13}\Big] = 0. \end{cases} \tag{8}$$

Эта система имеет следующие решения:

a) $\sin\varphi = 0$; $\cos\varphi \neq 0$; $\mathbf{L}_1 \neq 0$; $\mathbf{L}_2 = 0$; $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_3 = -\mathbf{s}_4 = 0.25\mathbf{L}_1$.

b) $\sin\varphi \neq 0$; $\cos\varphi = 0$; $\mathbf{L}_1 = 0$; $\mathbf{L}_2 \neq 0$; $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_4 = -\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_3 = 0.25\mathbf{L}_2$.

c) $\cos 2\varphi = \cos^2\varphi - \sin^2\varphi = 0$; $|\mathbf{L}_1| = |\mathbf{L}_2|$; $\mathbf{s}_1 \perp \mathbf{s}_2$; $\mathbf{s}_1 = -\mathbf{s}_3$; $\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_4$; $\mathbf{s}_3 \perp \mathbf{s}_4$.

Симметрия магнитной подсистемы понижается до C_{2h}, причем ось второго порядка проходит по диагонали квадрата, в котором расположены магнитные ионы.

d) $\eta = 0$; $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 = 0$ — парамагнитное состояние.

e) $\Phi_3 - \Phi_8 = 0$.

В этом случае угол φ задается произвольно и имеют место следующие состояния:

*e*1) $\varphi < \pi/4$; $|\mathbf{L}_1| > |\mathbf{L}_2|$, $0 < \mathbf{s}_1\hat{\ }\mathbf{s}_2 < \pi/2$; $\mathbf{s}_1 = 0.25(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2) = -\mathbf{s}_3$; $\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_4 = 0.25(\mathbf{L}_1 - \mathbf{L}_2)$;

*e*2) $\pi/4 < \varphi < \pi/2$; $|\mathbf{L}_1| < |\mathbf{L}_2|$; $\pi/2 < \mathbf{s}_1\hat{\ }\mathbf{s}_2 < \pi$; $\mathbf{s}_1 = 0.25(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2) = -\mathbf{s}_3$, $\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_4 = 0.25(\mathbf{L}_1 - \mathbf{L}_2)$;

f) $\Phi_3 = \Phi_8 = \Phi_{13} = 0$; $\mathbf{L}_1 \neq 0$; $\mathbf{L}_2 \neq 0$

— самая низкосимметричная фаза.

3.2) $\mathbf{L}_1 \parallel \mathbf{L}_2$. Направляя вдоль $\mathbf{L}_1$ координатную ось, получаем систему уравнений, определяющую возможные состояния

$$\begin{cases} \partial\Phi/\partial L_1 = 2L_1(\Phi_3 + \Phi_5 L_2^2 + \Phi_8 L_1^2 + \Phi_{13} L_2^2) = 0, \\ \partial\Phi/\partial L_2 = 2L_2(\Phi_3 + \Phi_5 L_1^2 + \Phi_8 L_2^2 + \Phi_{13} L_1^2) = 0. \end{cases} \tag{9}$$

Отсюда следует, что кроме парамагнитного имеют место еще следующие решения:

a) $\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 = \mathbf{L}$. Из (2) получаем $\mathbf{s}_1 = -\mathbf{s}_3 = 0.5\mathbf{L}$; $\mathbf{s}_2 = \mathbf{s}_4 = 0$. Отсюда следует, что среднее значение спина и обменного взаимодействия на ионах с номерами 2 и 4, расположенных по диагонали квадрата, равно нулю. Обменная симметрия меняется и становится D_{2h}. Данная конфигурация описывает появление так называемого «скрытого» парамагнетизма [8]. Весьма любопытным было бы поведение кристалла при $|\mathbf{s}| = 2$ с такой магнитной конфигурацией (антиферромагнетизм (АФМ) типа «легкая» плоскость) в перпендикулярном магнитном поле. АФМ-ионы будут намагничиваться скачками в полях определенной величины. Парамагнитные ионы довольно быстро переходят в насыщение. В некоторых промежуточных полях приходящаяся на один ион намагниченность вдоль перпендикулярной «легкой» плоскости оси будет иметь следующее значение (в магнетонах Бора):

$$M_z = 2 \cdot 2 \cdot 1/4 + 2 \cdot 1 \cdot 1/4 = 3/2. \tag{10}$$

Появление множителя 1/4 связано с тем, что только четвертая часть каждого иона входит в элементарную ячейку. В то же время полная намагниченность равна 2μ. Следовательно, скачок намагниченности будет составлять 3/4 от максимальной. Это значение отличается от соответствующей величины в кристаллах с треугольной конфигурацией, которая равна 2/3 [9,10]. Возможна также ситуация, когда спины АФМ-ионов совершают скачок в относительно слабых полях, когда парамагнитные ионы еще не вошли в насыщение. Тогда на кривой парамагнитного намагничения должны наблюдаться изломы.
b) При $\mathbf{L}_1 = -\mathbf{L}_2 = \mathbf{L}$ имеем состояние $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_3 = 0$, $\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_4 = 0.5\mathbf{L}$. Эта конфигурация также описывает «скрытый» парамагнетизм.

4) $\mathbf{F} \neq 0, \quad \mathbf{Q} \neq 0, \quad \mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2 = 0.$

Для рассмотрения таких состояний необходимо учесть инварианты I_1, I_2, I_4. В этом случае имеем

$$\begin{cases} \partial\Phi/\partial\mathbf{Q} = 2\Phi_2\mathbf{Q} + 2\Phi_4(\mathbf{FQ})\mathbf{F} = 0, \\ \partial\Phi/\partial\mathbf{F} = 2\Phi_1\mathbf{F} + 2\Phi_4(\mathbf{FQ})\mathbf{Q} = 0. \end{cases} \tag{11}$$

Из этих уравнений следует, что вектор $\mathbf{Q}$ коллинеарен с вектором $\mathbf{F}$. Спины ионов определяются следующим образом:

$$\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_3 = 0.25(\mathbf{F} + \mathbf{Q}), \quad \mathbf{s}_2 = \mathbf{s}_4 = 0.25(\mathbf{F} - \mathbf{Q}).$$

Если имеется состояние типа «легкая» ось, то симметрия понижается до C_{2v}. Для состояния типа «легкая» плоскость из всех элементов симметрии остается только эта плоскость.

5) $\mathbf{F} \neq 0, \quad \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2 = 0, \quad \mathbf{Q} = 0.$

Для рассмотрения возможных структур необходимо учесть инварианты I_1, I_3, I_6, I_8, I_9, I_{10}, I_{13}. Переходя от переменных L_1 и L_2 к полярным согласно формулам $L_1 = \eta\cos\varphi$, $L_2 = \eta\sin(\varphi)$, получаем систему уравнений

$$F^2\eta^2\cos^2\varphi\sin 2\alpha\Big[\Phi_6 + F^2\eta^2(2\Phi_9\cos^2\varphi\cos^2\alpha + \Phi_{10}\sin^2\varphi\cos^2\beta)\Big] = 0,$$

$$F^2\eta^2\sin^2\varphi\sin 2\beta\Big[\Phi_6 + F^2\eta^2(2\Phi_9\cos^2\varphi\cos^2\beta + \Phi_{10}\cos^2\varphi\cos^2\alpha)\Big] = 0,$$

$$2\Phi_1 F + 2\Phi_6\Big[(\mathbf{FL}_1)L_1\cos\alpha + (\mathbf{FL}_2)L_2\cos\beta\Big] + 4\Phi_9\Big[(\mathbf{FL}_1)^3L_1\cos\alpha +$$

$$+(\mathbf{FL}_2)^3L_2\cos\beta\Big] + 2\Phi_{10}\Big[(\mathbf{FL}_1)(\mathbf{FL}_2)L_1\cos\alpha + (\mathbf{FL}_1)L_2\cos\beta\Big] = 0,$$

$$\eta\Big[2\Phi_3 + 2\Phi_6F^2(\cos^2\varphi\cos^2\alpha + \sin^2\varphi\cos^2\beta) + 2\Phi_8\eta^2(2 - \sin^2 2\varphi) +$$

$$+\Phi_{10}\eta^2F^2\sin^2 2\varphi\cos^2\alpha\cos^2\beta + \Phi_{13}\eta^2\sin^2 2\varphi\Big] = 0,$$

$$\eta^2\sin 2\varphi\Big[(\Phi_6F^2 + \Phi_9F^4\eta^2)(\cos^2\beta - \cos^2\alpha) + (\Phi_{10}F^4\cos^2\alpha\cos^2\beta +$$

$$+\Phi_{13})\eta^2\cos 2\varphi\Big] = 0, \tag{12}$$

где α, β — углы между $\mathbf{F}$ и векторами $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ соответственно. Из системы (12) следует, что возможны следующие магнитные конфигурации:

5.1) $\alpha = \pi/2$, $\beta = \pi/2$, т.е. $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{F}$.

В этом случае система (12) распадается на две независимые подсистемы, одна из которых определяет поведение $\mathbf{F}$, а вторая — $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$. Следовательно, такое состояние не реализуется.

5.2) $\alpha = 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi \neq 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$. *a*) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$ — антиизоструктурные состояния.

5.3) $\alpha = \pi/2$, $\beta = 0$, $\varphi \neq 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{L}_1$. *a*) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$ — антиизоструктурные состояния.

5.4) $\alpha = 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi = 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2 = 0$.

5.5) $\alpha = 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi = \pi/2$, $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.

Система разбивается на две независимые подсистемы для определения $\mathbf{F}$ и $\mathbf{L}_2$. Такое состояние не реализуется.

5.6) $\alpha = \pi/2$, $\beta = 0$, $\varphi = 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$ (аналогично 5.5).

5.7) $\alpha = \pi/2$, $\beta = 0$, $\varphi = \pi/2$, $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2$.

5.8) $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$.

Углы α и β определяются из равенства нулю квадратных скобок первого и второго уравнений системы (12), т.е.

$\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \neq 0$. *a*) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$ — антиизоструктурные состояния.

5.9) $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$, $\varphi = 0$, $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$.

5.10) $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$, $\varphi = \pi/2$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{L}_1 = 0$.

5.11) $\alpha = \pi/2$, $\beta \neq 0$, $\varphi = 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$ (аналогично 5.6).

5.12) $\alpha = \pi/2$, $\beta \neq 0$, $\varphi = \pi/2$, $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$.

5.13) $\alpha = \pi/2$, $\beta \neq 0$, $\varphi \neq 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$.

a) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_2) > 0$, *b*) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_2) < 0$,

c) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_2) > 0$, *d*) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_2) < 0$.

5.14) $\alpha \neq 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi = 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{L}_1 \neq 0$.

5.15) $\alpha \neq 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi = \pi/2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{L}_1 = 0$.

Система уравнений распадается и такая конфигурация не реализуется.

5.16) $\alpha \neq 0$, $\beta = \pi/2$, $\varphi \neq 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$.

a) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_1) > 0$, *b*) $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_1) < 0$,

c) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_1) > 0$, *d*) $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$, $(\mathbf{F}\mathbf{L}_1) < 0$.

6) $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{L}_1 \parallel \mathbf{L}_2$, $Q = 0$.

Здесь отличны от нуля инварианты $I_1, I_3, I_5, I_6, I_8, I_9, I_{10}, I_{13}, I_{20}, I_{24}$. Направляя координатную ось вдоль $\mathbf{L}_1$, получаем систему

$$2F\Big[\Phi_1 + (L_1^2 + L_2^2)(\Phi_6 + \Phi_{20}L_1^2L_2^2)\cos^2\alpha + L_1^2L_2^2(\Phi_{24} + 2\Phi_{10}F^2\cos^4\alpha) +$$

$$+2\Phi_9(L_1^4 + L_2^4)F^2\Big] = 0,$$

$$F^2\sin 2\alpha\Big[\Phi_6(L_1^2+L_2^2)+\Phi_9F^2(L_1^4+L_2^4)\cos^2\alpha+L_1^2L_2^2(\Phi_{10}F^2\cos^2\alpha+\Phi_{24})+$$
$$+\Phi_{20}L_1^2L_2^2(L_1^2+L_2^2)\Big]=0,$$
$$2L_1\Big[\Phi_3+\Phi_5L_2^2+\Phi_6F^2\cos^2\alpha+2\Phi_8L_1^2+2\Phi_9F^4L_1^2\cos^4\alpha+\Phi_{10}F^4L_2^2\cos^4\alpha+$$
$$+\Phi_{13}L_2^2+\Phi_{20}L_2^2F^2(2L_1^2+L_2^2)+\Phi_{24}F^2L_2^2\Big]=0,$$
$$2L_2\Big[\Phi_3+\Phi_5L_1^2+\Phi_6F^2\cos^2\alpha+2\Phi_8L_2^2+2\Phi_9F^4L_2^2\cos^4\alpha+\Phi_{10}F^4L_1^2\cos^4\alpha+$$
$$+\Phi_{13}L_1^2+\Phi_{20}F^2L_1^2(L_1^2+2L_2^2)+\Phi_{24}F^2L_1^2\Big]=0. \qquad (13)$$

Решения этой системы определяют следующие состояния

6.1) $\alpha=\pi/2$, $\mathbf{F}\perp\mathbf{L}_1\parallel\mathbf{L}_2$.

Система распадается на две независимые подсистемы. Такое состояние не реализуется.

6.2) $\alpha=0$, $\mathbf{F}\perp\mathbf{L}_1\parallel\mathbf{L}_2$.

Спины всех ионов коллинеарны.

6.2.1) $\mathbf{L}_1=\mathbf{L}_2=\mathbf{L}$, $\mathbf{s}_1=0.25(\mathbf{F}+2\mathbf{L})$, $\mathbf{s}_2=\mathbf{s}_3=0.25\mathbf{F}$; $\mathbf{s}_4=0.25(\mathbf{F}+\mathbf{L}_2)$.

6.2.2) $\mathbf{L}_1=-\mathbf{L}_2=\mathbf{L}$, $\mathbf{s}_1=\mathbf{s}_3=0.25\mathbf{F}$, $\mathbf{s}_2=0.25(\mathbf{F}+2\mathbf{L})$, $\mathbf{s}_4=0.25(\mathbf{F}-2\mathbf{L})$.

Две последние конфигурации описывают «скрытый» ферромагнетизм или «скрытый» антиферромагнетизм в зависимости от того, какое состояние является основным.

6.2.3) $\mathbf{L}_1\neq0$, $\mathbf{L}_2\neq0$, $\mathbf{s}_1=0.25(\mathbf{F}+\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2)$, $\mathbf{s}_2=0.25(\mathbf{F}+\mathbf{L}_1-\mathbf{L}_2)$,
$\mathbf{s}_3=0.25(\mathbf{F}-\mathbf{L}_1-\mathbf{L}_2)$, $\mathbf{s}_4=0.25(\mathbf{F}-\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2)$.

6.3) $\alpha\neq0$, $\mathbf{L}_1\parallel\mathbf{L}_2$, $\mathbf{F}\neq0$.

6.3.1) $\mathbf{L}_1=\mathbf{L}_2$.

6.3.2) $\mathbf{L}_1=-\mathbf{L}_2$.

Аналогично 6.2.1, 6.2.2 два последних пункта также описывают «скрытые» состояния.

6.3.3) $\mathbf{L}_1\neq\mathbf{L}_2$.

В случаях 6.3.1–6.3.3 векторы $\mathbf{s}_i$ определяются также, как и в 6.2.1–6.2.3, но они не будут коллинеарными.

7) Аналогичным образом можно рассмотреть состояния $\mathbf{Q}\neq0$, $\mathbf{L}_1\perp\perp\mathbf{L}_2$ ($\mathbf{L}_1\parallel\mathbf{L}_2$). Ввиду громоздкости мы не будем проводить такого анализа.

8) $\mathbf{L}_1\neq0$, $\mathbf{L}_2\neq0$, $\mathbf{F}\neq0$, $\mathbf{Q}\neq0$.

Получающиеся уравнения состояния громоздких и здесь приведены не будут. Отметим только допустимые конфигурации.

8.1) $\mathbf{F}\parallel\mathbf{Q}\parallel\mathbf{L}_1\perp\mathbf{L}_2$. *a*) $\mathbf{L}_1^2>\mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2<\mathbf{L}_2^2$.

8.2) $\mathbf{F}\parallel\mathbf{Q}\parallel\mathbf{L}_2\perp\mathbf{L}_1$. *a*) $\mathbf{L}_1^2>\mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2<\mathbf{L}_2^2$.

8.3) $\mathbf{F}\parallel\mathbf{L}_1\perp\mathbf{L}_2\parallel\mathbf{Q}$. *a*) $\mathbf{L}_1^2>\mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2<\mathbf{L}_2^2$.

8.4) $\mathbf{F}\parallel\mathbf{L}_2\perp\mathbf{L}_1\parallel\mathbf{Q}$. *a*) $\mathbf{L}_1^2>\mathbf{L}_2^2$, *b*) $\mathbf{L}_1^2<\mathbf{L}_2^2$.

8.5) $\mathbf{F} \parallel \mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$. $\quad a)$ $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $b)$ $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$.

8.6) $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \neq 0$. $\quad a)$ $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $b)$ $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$.

8.7) $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \neq 0$. $\quad a)$ $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $b)$ $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$.

8.8) $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{Q} \neq 0$. $\quad a)$ $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $b)$ $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$.

8.9) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$. $\quad a)$ $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$, $b)$ $\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2$.

В 8.1–8.9 состояния $a)$ и $b)$ являются антиизоструктурными.

8.10) $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$.

$a), b)$ $(\mathbf{FL}_2) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$,

$c), d)$ $(\mathbf{FL}_2) < 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.11) $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.

$a), b)$ $(\mathbf{FL}_1) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$,

$c), d)$ $(\mathbf{FL}_1) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.12) $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$.

$a), b)$ $(\mathbf{FL}_2) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$,

$c), d)$ $(\mathbf{FL}_2) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.13) $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.

$a), b)$ $(\mathbf{FL}_1) > 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$,

$c), d)$ $(\mathbf{FL}_1) < 0$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

В 8.10–8.13 имеются антиизоструктурные состояния.

8.14) $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$.

Все возможные состояния этого пункта получаются путем комбинации трех условий

$$(\mathbf{FL}_2) > 0 \ ((\mathbf{FL}_2) < 0), \ (\mathbf{QL}_2) > 0 \ ((\mathbf{QL}_2) < 0), \ \mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2 \ (\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2).$$

8.15) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.

Здесь также возможные состояния разделяются путем комбинации условий

$$(\mathbf{QL}_2) > 0 \ ((\mathbf{QL}_2) < 0), \ (\mathbf{FL}_1) > 0 \ ((\mathbf{FL}_1) < 0), \ \mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2 \ (\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2).$$

8.16) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$.

Условия: $(\mathbf{QL}_1) > 0$ $((\mathbf{QL}_1) < 0)$, $(\mathbf{FL}_2) > 0$ $((\mathbf{FL}_2) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.17) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.

Условия: $(\mathbf{QL}_1) > 0$ $((\mathbf{QL}_1) < 0)$, $(\mathbf{FL}_1) > 0$ $((\mathbf{FL}_1) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.18) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \neq 0$.

Условия: $(\mathbf{QL}_2) > 0$ $((\mathbf{QL}_2) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.19) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \neq 0$.

Условия: $(\mathbf{QL}_1) > 0$ $((\mathbf{QL}_1) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.20) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_1$.

Условия: $(\mathbf{FL}_2) > 0$ $((\mathbf{FL}_2) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.21) $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$.
Условия: $(\mathbf{FL}_1) > 0$ $((\mathbf{FL}_1) < 0)$, $\mathbf{L}_1^2 > \mathbf{L}_2^2$ $(\mathbf{L}_1^2 < \mathbf{L}_2^2)$.

8.22) $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$.
Условия: $(\mathbf{QL}_2) > 0$ $((\mathbf{QL}_2) < 0)$, $(\mathbf{FL}_2) > 0$ $((\mathbf{FL}_2 < 0)$.

8.23) $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$.
Условия: $(\mathbf{QL}_1) > 0$ $((\mathbf{QL}_1) < 0)$, $(\mathbf{FL}_1) > 0$ $((\mathbf{FL}_1 < 0)$.

8.24) $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2$.
Условия: $(\mathbf{QF}) > 0$ $((\mathbf{QF}) < 0)$.

8.25) $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_1$.
Условия: $(\mathbf{QF}) > 0$ $((\mathbf{QF}) < 0)$.

8.26) $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2$.
Условия: $(\mathbf{FL}_2) > 0$ $((\mathbf{FL}_2) < 0)$.

8.27) $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_2$.
Условия: $(\mathbf{FL}_1) > 0$ $((\mathbf{FL}_1) < 0)$.

8.28) $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \neq 0$.
Условия: $(\mathbf{QL}_2) > 0$ $((\mathbf{QL}_2) < 0)$.

8.29) $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{L}_1$, $\mathbf{F} \neq 0$.
Условия: $(\mathbf{QL}_1) > 0$ $((\mathbf{QL}_1) < 0)$.

8.30) $\mathbf{L}_1 = 0$, $\mathbf{L}_2 \neq 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$.

8.31) $\mathbf{L}_1 \neq 0$, $\mathbf{L}_2 = 0$, $\mathbf{F} \neq 0$, $\mathbf{Q} \neq 0$.

Случай $\mathbf{F} \perp \mathbf{L}_2$, $\mathbf{F} \parallel \mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_1 \perp \mathbf{L}_2$ сводится к предыдущему. Система уравнений, описывающая конфигурацию, после замены коэффициентов совпадает с (10).

Список литературы

[1] Бужинский С.А., Вальков В.И., Романова Н.А. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 7. С. 1936–1939.
[2] Кротов С.С., Фарзетдинова Р.М. // СФХТ. 1989. Т. 2. № 2. С. 60–67.
[3] Завадский Э.А., Каменев В.И., Цымбал Л.Т., Черкасов А.Н., Алексеевский Н.Е., Ким С.Ф. // СФХТ. 1990. Т. 3. № 11. С. 2538–2543.
[4] Спенсер Э. Теория инвариантов. М.: Мир, 1974. 150 с.
[5] Кертис Ч., Райнер И. Теория представлений конечных групп и ассоциативных алгебр. М.: Наука, 1969. 180 с.
[6] Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. 304 с.
[7] Ведяшкин А.В., Гуфан Ю.М. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 3. С. 714–723.
[8] Гуфан Ю.М., Кутьин Е.И., Лорман В.Л., Прохоров А.М., Рудашевский Е.Г. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 6. С. 228–230.
[9] Завадский Э.А., Тодрис Б.М., Заворотнев Ю.Д., Асадов С.К. // Тез. докл. XXIII Всес. совещ. по физике низких температур. Таллинн, 1984. Ч. 3. С. 54–55.
[10] Suzuki Naoshi, Tagawa Yukio. // Physica B. 1989. V. 155. N 13. P. 375–378.