

УДК 538.1:548

©1995

## ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ НА ФОРМИРОВАНИЕ НЕСОИЗМЕРИМЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$

О.В.Ковалев

Харьковский физико-технический институт,  
310108, Харьков, Украина  
(Поступила в Редакцию 18 января 1995 г.  
В окончательной редакции 24 апреля 1995 г.)

Предложен и продемонстрирован на примере микроскопический метод учета анизотропии.

1. В теоретических исследованиях магнитных структур в простых случаях (одноосный кристалл, ферромагнетизм) магнитная анизотропия достаточно хорошо описывается феноменологически слагаемыми вида  $M_\alpha M_\beta$ . Однако, например, при фазовых переходах в ромбических кристаллах, переходах в несоизмеримые или антиферромагнитные структуры такой подход оказывается неприемлемым, необходим микроскопический подход. Здесь на примере кристалла  $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$  (две системы эквивалентных позиций, несоизмеримость) коэффициенты при анизотропных инвариантных комбинациях (ИК) строятся из коэффициентов при парном взаимодействии магнитных моментов (ММ) атомов в соответствии с методикой работ [1,2] и выясняется роль анизотропных ИК в образовании магнитной структуры. В предыдущей работе [3] рассматривалась магнитная структура в обменном приближении. Далее номера формул из [2,3] снабжены дополнительными цифрами 2 и 3 соответственно.

2. Отметим неизбежную некорректность применяемой методики. Во-первых, речь идет только об ИК второго порядка. Коэффициенты при ИК более высокого порядка (обменных и необменных) вычислению не поддаются, хотя сами ИК можно записать из соображений симметрии. Во-вторых, несмотря на то что мы стараемся использовать первые принципы, нам не удастся избежать привязки к определенной модели и введения параметров. Действительно, пусть  $\mu_1$  и  $\mu_2$  — ММ двух атомов,  $\mathbf{R}_{12}$  — соединяющий их вектор. Во втором порядке энергия их магнитного взаимодействия определяется двумя слагаемыми  $I_1 = \alpha_{12}\mu_1\mu_2$  и  $I_2 = \beta_{12}(\mu_1\mathbf{R}_{12})(\mu_2\mathbf{R}_{12})$ , ибо только они инвариантны относительно полной ортогональной группы и операции обращения времени. Коэффициенты при ИК строятся из коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta$ , различных для разных пар атомов. Лишь для диполь-дипольного взаимодействия известна зависимость  $\alpha$  и  $\beta$  от расстояния. Она неизвестна

для обменного и спин-орбитального взаимодействий. Например, мы не знаем, как следует разбить коэффициент  $\alpha$  на сумму трех, относящихся к указанным взаимодействиям, а между тем такие разбиения различны для разных пар атомов. Мы пренебрегаем также влиянием немагнитных атомов.

Здесь выбрана следующая модель. Считается, что в  $[^3]$  изотропное взаимодействие является чисто обменным, и таковы фигурирующие там параметры. Анизотропия вводится включением диполь-дипольного взаимодействия

$$\phi(1/2) = R_1^{-3} \left[ \mu_1 \mu_2 - 3(\mu_1 \mathbf{R}_{12})(\mu_2 \mathbf{R}_{12}) R_{12}^{-2} \right]. \quad (1)$$

Отношение его величины к величине обменного считается параметром, которому будут приданы различные значения с целью выяснить, в какой мере от этого отношения зависят характеристики спирали.

Отметим два момента.

а) Благодаря указанной параметризации учитывается, по существу, и спин-орбитальное взаимодействие, так как оно отличается от (1) лишь другой зависимостью от расстояния и некоторым числовым коэффициентом.

б) Можно было бы ограничиться вторым слагаемым в (1), отнеся первое к обменному взаимодействию. Мы, однако, ниже учитываем и первое, поскольку его вклад в общую изотропную энергию по сравнению с чисто обменной частью относительно велик для удаленных атомов и мал для близких. Это сводится к более сильной перенормировке коэффициентов  $s$  и  $e$ , используемых в  $[^3]$ , и, следовательно, к более заметной деформации области параметров, в которой реализуется спираль.

3. Анизотропную часть энергии вычисляем по формулам (21,2)–(27,2). Чтобы облегчить сравнение обменных и необменных слагаемых, нужно в формулах (22,2), (23,2) и (27,2) перейти от координат  $m(Fji)$  к координатам  $\mu(\alpha F'j'i')$ . Поясним ситуацию.

Базисные векторы (БВ)  $e_\alpha \varphi(F'j'i')$ , по предположению, взаимно ортогональны, они осуществляют, вообще говоря, приводимое копредставление  $D^{F'j'} \times V_m$  группы  $G + KG$ , где  $D^{F'j'}$  — неприводимое копредставление (НКП), содержащееся в перестановочном копредставлении  $P$ . Магнитные координаты  $\mu(\alpha F'j'i')$  не являются симметризованными.

БВ  $\psi(Fji)$  осуществляют НКП  $D^{Fj}$ , содержащееся в копредставлении  $D_m = P \times V_m$  (т.е. магнитные координаты  $m(Fji)$  являются симметризованными). Из (6,2) следует связь

$$m(Fji) = \sum S(\alpha F'j'i'/Fji)^* \mu(\alpha F'j'i'). \quad (2)$$

Порядок матрицы  $S$  равен размерности копредставления  $D_m$ , она может оказаться достаточно сложной и, главное, определяется неоднозначно, если числа вхождения некоторых НКП в  $D_m$  или тем более в  $P$  больше единицы. В общем случае БВ  $\psi(Fji)$  могут быть выбраны независимо от БВ  $\varphi(F'j'i')$ . Если связь между этими системами БВ не представляет интереса, то БВ  $\psi(Fji)$  проще всего строить по правилу, описанному в  $[^4,5]$ .

Максимально простой и удобный в нашей задаче вид матрицы  $S$  получаем следующим образом. БВ и координаты находим отдельно для каждой системы позиций. Отдельно для каждого НКП  $D^{F'j'}$  из  $P$  строим симметризованные базисы  $\varphi(F'j'i')$  и далее векторы  $e_\alpha\varphi(F'j'i')$ . Пространство векторов  $e_\alpha\varphi(F'j'i')$  разбиваем на неприводимые с БВ  $\psi(Fji)$ , где  $D^{Fj}$  — это только те НКП, которые содержатся в произведении  $D^{F'j'} \times V_m$ . При этом матрица  $S$  приобретает квазидиагональный вид, каждый ее блок относится к определенному двойному индексу  $F'j'$  (строки) и соответствующему набору  $Fj$  НКП из  $D^{F'j'} \times V_m$  (столбцы). Фигурирующие в [2] однородные ИК  $i_{jj}$  и коэффициенты при них характеризуются не только индексом  $Fj$ , но и индексом  $F'j'$ . Дальнейшее упрощение матрицы  $S$  невозможно.

Обратимся непосредственно к кристаллу  $\text{Cr}_2\text{BeO}_4$  и вектору  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_7 = (k, 0, 0)$ . В этом случае (как, впрочем, в большинстве задач по несоизмеримым магнитным структурам) имеет место равенство  $j' = 1$ . Индекс  $F'$  принимает значения 1, 2, 3, 4. Поскольку все малые НКП одномерны, индексы  $i$  и  $i'$  опускаем. Положим для определенности  $F' = 3$ . Орты  $e_x, e_y$  и  $e_z$  преобразуются по НКП  $d_0^2, d_0^1$  и  $d_0^4$  группы  $C_{2v} + K g_{25} C_{2v}$  соответственно (ТЗО в [5]). Векторы  $e_x\varphi(3), e_y\varphi(3)$  и  $e_z\varphi(3)$  — по НКП  $d^4, d^1$  и  $d^2$  соответственно. Блок матрицы  $S$ , характеризуемый индексом  $F' = 3$ , оказывается трехмерной единичной матрицей при только что выбранной последовательности строк и столбцов. Этот результат одинаково относится к обеим системам позиций. Итак, при  $F' = 3$  имеем три однородные ИК, связанные с одной системой позиций, и столько же со второй.

При соответствующей нумерации строк и столбцов можно записать остальные блоки матрицы  $S$  в виде единичных матриц, а именно:

$$\text{строки } \alpha^{F'} = x1, y1, z1, \quad \text{столбцы } F = 2, 3, 4;$$

$$\text{строки } \alpha^{F'} = x2, y2, z2, \quad \text{столбцы } F = 1, 4, 3;$$

$$\text{строки } \alpha^{F'} = x4, y4, z4, \quad \text{столбцы } F = 3, 2, 1.$$

Отметим, что в одном блоке значения  $F$  различны.

ИК и коэффициенты при них вычисляем по формулам (22,2), (23,2) и (27,2). Пользуемся видом матрицы  $S$  и введенными в [3] обозначениями  $\mu(\alpha, F', j' = 1, i' = 1) = \mu(\alpha F'1)$ ,  $\mu(\alpha, F', j' = 2, i' = 1) = \mu(\alpha F'2)$ . Индекс  $j' = 1$  относим к первой системе позиций, индекс  $j' = 2$  — ко второй. Для некоторого одного значения  $F'$  результат таков. К обменной энергии добавляется энергия  $H_d(F') = \sum H(\alpha F')$ , где

$$H(\alpha F') = A(\alpha F')_{11}\mu(\alpha F'1)^*\mu(\alpha F'1) + A(\alpha F')_{22}\mu(\alpha F'2)^*\mu(\alpha F'2) + \\ + A(\alpha F')_{12} \left[ \mu(\alpha F'1)^*\mu(\alpha F'2) + \mu(\alpha F'1)\mu(\alpha F'2)^* \right], \quad (3)$$

$$A(\alpha F')_{mn} = \frac{1}{2} \sum D(\alpha p/\alpha p') R_3(p/m)^* R_3(p'/n), \quad (4)$$

$$D(\alpha p/\alpha p') = \varepsilon(p)^*\varepsilon(p') \sum_a \Phi(\alpha p a/\alpha p' 0) \exp(-ika). \quad (5)$$

В (4) суммирование производится по  $p$  и  $p'$  следующим образом: если  $m = n = 1$ , то  $p, p' = 1, 2, 3, 4$ ; если  $m = n = 2$ , то  $p, p' = 5, 6, 7, 8$ ; если  $m = 1, n = 2$ , то  $p = 1, 2, 3, 4$  и  $p' = 5, 6, 7, 8$ . Величины  $D$  и  $R_3$  относятся к выбранному  $F'$  и различны для разных  $F'$ . Согласно (1),

$$\Phi(\alpha p / \alpha p' 0) = R^{-3}(1 - 3n_\alpha^2), \quad (6)$$

где  $\mathbf{R}$  — вектор, соединяющий позиции  $(p, \mathbf{a})$  и  $(p', 0)$ ,  $n_\alpha = R_\alpha / R$ . Из приведенных выражений видно, что коэффициенты  $A(\alpha F')_{mn}$  вычисляются по таким же формулам, что и коэффициенты  $A(F')_{mn}$  в обменном приближении в [3], нужно лишь заменить обменные константы величинами (6). Обусловленная симметрией связь одинакова для величин (5) и  $D(p/p')$  из [3]. Поэтому можно сразу записать коэффициенты  $A(\alpha F')_{mn}$ , просто заменив в формулах (2,3)–(5,3) константы  $\Phi(p\mathbf{a}/p'0)$  на величины (6). Это ведет к добавкам  $\Delta a - \Delta e$  к параметрам  $a - e$ , введенным в [3]. Добавки различны для разных  $\alpha$  и  $F'$ .

К полученным результатам можно прийти без вычислений, основываясь на том, что в рассматриваемом кристалле возможны лишь ИК, записанные в (3). Вычисления приведены ради пояснения общей методики (выбор БВ, определение матрицы  $S$ ).

4. Будем иметь в виду некоторый определенный индекс  $F'$ . Энергия является суммой трех эрмитовых квадратичных форм (3). Каждая форма содержит две комплексные координаты  $\mu(\alpha F' 1)$  и  $\mu(\alpha F' 2)$ . В обменном приближении коэффициенты  $A$  во всех трех формах одинаковы, и поэтому одинаковы их собственные значения. Мы говорим об одной паре собственных значений  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , которые можно условно назвать обменными.

При учете анизотропии благодаря добавкам к коэффициентам  $A$  (или параметрам  $a - e$ ) значения коэффициентов квадратичных форм различны для разных  $\alpha$ . Соответственно вместо меньшего обменного значения  $\lambda_2$  мы получим три значения  $\lambda_{2x}, \lambda_{2y}, \lambda_{2z}$ . Анизотропия расщепляет энергетические уровни. Если анизотропная энергия сравнима с обменной, то минимумы значений  $\lambda_{2\alpha}$  могут сильно сместиться по отношению к минимуму значения  $\lambda_2$  и даже вообще исчезнуть. Этот вариант здесь не рассматривается, но его следует иметь в виду. Мы остановимся на случае, когда анизотропная энергия по сравнению с обменной достаточно мала и упомянутые эффекты не имеют места. При этом анизотропия по меньшей мере ориентирует несоизмеримость. Если известно, что несоизмеримость коллинеарна и что, например,  $\lambda_{2x} < \lambda_{2y}, \lambda_{2z}$  в районе минимумов, то ММ атомом выстраиваются вдоль оси  $X$ . Если известно, что несоизмеримость спиральна и что, например,  $\lambda_{2x}, \lambda_{2y} < \lambda_{2z}$ , то ММ атомов поворачиваются в плоскости  $XY$ .

То, в какой последовательности идут величины  $\lambda_{2\alpha}$ , зависит от  $F'$ , а также от значения параметра  $k$ . Нас, конечно, интересуют те его значения, которые близки к точке  $k_m$ , в которой минимально  $\lambda_2$ . Точка  $k_m$  должна определяться в обменном приближении с привлечением ИК высокого порядка. Известно, что разным температурам в некоторых кристаллах могут соответствовать разные векторы  $k_m$ , характеризующие магнитную несоизмеримость. Если, как в нашем примере, БВ  $e_\alpha \varphi(F')$  преобразуются по неэквивалентным НКП и поэтому кривые  $\lambda_{2\alpha}(k)$  могут пересекаться, то возможен такой эффект: при изменении шага спирали изменяется ориентация плоскости поворотов ММ атомов.

5. Для каждого из четырех вариантов  $F' = 1, 2, 3, 4$  и каждого значения  $\alpha = x, y, z$  по формуле (6) мы вычислили добавки  $\Delta a - \Delta e$ , измеряя расстояния в ангстремах. Тем самым мы получили лишь знаки добавок и отношения между ними. Числовые значения истинных добавок, которые следует далее использовать, обуславливаются предположением об отношении анизотропной энергии к обменной. Мы сделали, например, так: все полученные «ангстремные» добавки разделили на 2000 и, в частности, для  $F' = 3$  и  $\alpha = x$  получили  $\Delta d = \kappa = 0.0013$ . Поскольку в [3] используются относительные единицы, в которых  $d = 1$ , то число  $\kappa = 0.0013$  выступает в роли параметра, характеризующего отношение анизотропной энергии к обменной. Более точно:  $\kappa$  есть отношение суммы энергий взаимодействий между атомом в позиции (1,0) и атомами в позициях (5,0), (5,  $a_2$ ), (5,  $a_3$ ), (5,  $-a_3$ ), (8,0), (8,  $a_2$ ), (8,  $-a_3$ ), (8,  $a_2 - a_3$ ) к сумме обменных взаимодействий между атомом в той же позиции (1,0) и атомами в тех позициях, которые принимались во внимание в [3]. При этом, очевидно, путем деления «ангстремных» добавок на 2000 мы приходим к истинным, «безразмерным» добавкам в предположении, что  $\kappa = 0.0013$ .

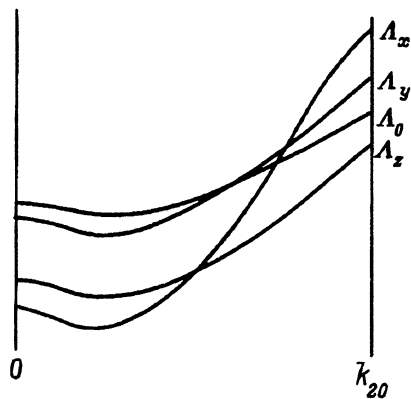
Подробное исследование требует рассмотрения разных значений отношения  $\kappa$ , но для нашей задачи — установить последовательность значений  $\lambda_{2\alpha}$  в районе минимума значения  $\lambda_2$ , — по-видимому, достаточно взять одно. Во всяком случае, как показывает проверка, увеличение и уменьшение в четыре раза значения  $\kappa$  не меняют последовательность  $\lambda_{2\alpha}$ . При увеличении  $\kappa$  в четыре раза у некоторых  $\lambda_{2\alpha}$  пропадает минимум.

При вычислении добавок мы принимали во внимание большее число соседних атомов, чем это делали в [3], а именно всякий раз останавливались, когда следующие соседи вносили незначительный вклад. Так делать допустимо, поскольку в (6) в знаменатель входит третья степень расстояния.

В таблице для  $F' = 3$  и  $\kappa = 0.0013$  приведены истинные значения добавок, умноженные на 1000. Вычислены кривые  $\Lambda_0 = 2(\lambda_{2\alpha} - a)$  и  $\Lambda_\alpha = 2(\lambda_{2\alpha} - a)$  и изображены на рисунке (неточно, но с сохранением качественных особенностей). Видно следующее: 1) включение дипольных добавок несколько сдвигает точки минимумов; 2) в области минимумов имеют место неравенства  $\Lambda_x < \Lambda_z < \Lambda_y$  (отсюда следует, что ММ атомов поворачиваются в плоскости  $XZ$ , т.е. имеет место циклоидальная спираль, наблюдающаяся на эксперименте в  $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$ ); 3) некоторые кривые пересекаются, так что, например, близко к границе первой зоны Бриллюэна имеет место последовательность  $\Lambda_z < \Lambda_y < \Lambda_x$ . Однако для правильного заключения об ориентации спирали в этой области нужно получить последовательность  $\Lambda_\alpha$  при условии, что  $\Lambda_0$  имеет минимум в этой приграничной области.

Анизотропные добавки к параметрам  $a-e$

$F' = 3$	$\Delta a_1$	$\Delta a_2$	$\Delta b_1$	$\Delta b_2$	$\Delta c_1$	$\Delta c_2$	$\Delta d$	$\Delta c$
$\alpha = x$	0.3	0.4	-91	35.7	-10.6	-10.6	1.3	0.4
$\alpha = y$	28.4	28.3	70.1	-55.3	12.2	12.1	16.3	0
$\alpha = z$	28.7	-28.3	20.6	19.4	-1.7	-1.6	-17.8	0.4



Расщепление уровня  $\Lambda_0$  обмен-  
ной энергии при  $F' = 3$ .

Аналогичные вычисления были сделаны и для  $F' = 1, 2, 4$ . При  $F' = 4$  в области минимумов  $\Lambda_y < \Lambda_z < \Lambda_x$  (обычная спираль, когда ось поворотов ММ атомов параллельна вектору  $\mathbf{k}$ ). В первой зоне Бриллюэна  $\Lambda_x < \Lambda_y < \Lambda_z$  для  $F' = 1$  и  $\Lambda_x < \Lambda_y < \Lambda_z$  для  $F' = 2$ .

6. Для более полного исследования ситуации в  $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$  вернемся к обменному приближению и обсудим отношение величин ММ атомов в первой и второй системах позиций. Пусть  $M_1$  и  $M_2$  — какие-либо компоненты векторов  $\mathbf{M}(31)$  и  $\mathbf{M}(32)$  в (1,3), например  $x$ -компоненты,  $H(3)_x = A_{jj'} M_j^* M_{j'}$  — связанная с ними часть обменной энергии  $H(3)$ . Форму (1,3) мы приводим к сумме квадратов с помощью некоторой матрицы  $B$  и вместе с тем получаем, что  $H(3)_x = \lambda_j M_j^* M_j'$ , где  $M_j' = B_{j'j} M_j$ ,  $\lambda_j$  — собственные значения,  $\lambda_2 < \lambda_1$ . Значение  $\lambda_2$  минимизируется.

В магнитной фазе  $M_1' = 0$ ,  $M_2' \neq 0$ , причем  $M_2'$  как-то определяется при минимизации термодинамического потенциала. Ясно, что  $x$ -компонента магнитной плотности принимает вид

$$\mathbf{M}(\mathbf{r})_x = \sum \mu(\alpha F' j' i') \varphi(F' j' i') = M_2' [B_{12}^* \varphi(311) + B_{22}^* \varphi(321)],$$

а отношение величин ММ атомов первой системы к таковым второй оказывается равным

$$\eta = \left| \frac{B_{12}}{B_{22}} \right| = \frac{A_{12}}{\lambda_2 - A_{11}} = \frac{2\rho(\sin \varphi + \cos \varphi) \sin \chi_m}{1 + 2\rho^2 \sin \varphi(\sin \varphi - \cos \varphi) \cos 2\chi_m},$$

где использованы обозначения из [3]. В случае  $\rho^2 = 2$ ,  $\varphi = 40^\circ$  получаем, что  $\chi_m \approx 10^\circ$ ,  $\eta = 0.53$ . Экспериментальные данные таковы:  $\chi_m \approx 12^\circ$ ,  $\eta = 0.56$ . Проведенные рассуждения приближенны, так что совпадение случайно. Однако не случайно то, что  $\eta \neq 0$  и  $\eta \neq 1$ .

7. Опишем полученные теоретически структуры. Из эксперимента берем во внимание тот факт, что в  $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$  реализуется спираль с  $\mathbf{k} = (k, 0, 0)$ . Анизотропия, как было выше показано, вынуждает нас остановиться на индексе  $F' = 3$  и принять, что ММ атомов поворачиваются в плоскости  $XZ$ . Из общего рассмотрения в [6] следует, что несоизмеримая структура описывается векторами  $\mathbf{R}_1 + i\mathbf{J}_1$  и  $\mathbf{R}_2 + i\mathbf{J}_2$ ,

где  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{J}$  — вещественные векторы. Спираль, в частности, осуществляется при выполнении условий

$$\mathbf{R}_1 \parallel \mathbf{R}_2, \quad \mathbf{J}_1 \parallel \mathbf{J}_2, \quad \mathbf{R}_1 \perp \mathbf{J}_1, \quad \mathbf{R}_2 \perp \mathbf{J}_2.$$

В [6] векторы  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{J}$  не ориентируются каким-либо специальным образом относительно кристалла, соответственно не ориентируется спираль. Ориентация векторов  $\mathbf{R}$  и  $\mathbf{J}$  обуславливает ориентацию спирали. Наблюдающуюся в  $\text{Sr}_2\text{BeO}_4$  ориентацию мы получим, если возьмем, например, такой случай:

$$\mathbf{R}_1 + i\mathbf{J}_1 = (ib_1, 0, a_1), \quad \mathbf{R}_2 + i\mathbf{J}_2 = (ib_2, 0, a_2).$$

С другой стороны, при приведении к сумме квадратов формы (3) остается свободным фазовый множитель, общий для  $\mu(\alpha F'1)$  и  $\mu(\alpha F'2)$ , этот множитель можно выбрать разным для различных  $\alpha$  (точнее, он определяется при учете ИК высокого порядка, но мы этого не делаем, а считаем его свободным; предполагаем, что фазы близки к нулю или  $|\delta_1 - \delta_2| \ll \chi_m$ ). В связи с этим и с учетом того, что лишь в чисто обменном приближении выполняются соотношения  $a_1 = b_1$  и  $a_2 = b_2$ , мы должны положить ( $F' = 3$ ;  $j = 1, 2$ ) компоненты векторов  $\mathbf{M}(31)$  и  $\mathbf{M}(32)$  равными

$$\begin{aligned} \mu(x31) &= ib_1 \exp i\delta_1, & \mu(z31) &= a_1 \exp i\delta_2, \\ \mu(x32) &= ib_2 \exp i\delta_1, & \mu(z32) &= a_2 \exp i\delta_2. \end{aligned}$$

Далее компоненты ММ атомов вычисляются по формуле (16,2), которая в данном случае приобретает вид

$$\mu(\alpha pn) \sim \text{Re } \varepsilon(p) R_3(p/3j) \mu(\alpha 3j) \exp 4in\chi, \quad (7)$$

где  $n$  нумерует ячейки вдоль оси  $X$ . Окончательно получим

$$\begin{aligned} \mu(x3n) &= -\mu(x1n) = b_1 \sin(4n\chi + \delta_1), & \mu(x2n) &= -\mu(x4n) = b_1 \sin(4n\chi + 2\chi + \delta_1), \\ \mu(z1n) &= -\mu(z3n) = a_1 \cos(4n\chi + \delta_2), & \mu(z4n) &= -\mu(z2n) = a_1 \cos(4n\chi + 2\chi + \delta_2), \\ \mu(x8n) &= -\mu(x5n) = b_2 \cos(4n\chi + \chi + \delta_1), & \mu(x6n) &= -\mu(x7n) = b_2 \cos(4n\chi + 3\chi + \delta_1), \\ \mu(z8n) &= -\mu(z5n) = a_2 \sin(4n\chi + \chi + \delta_2), & \mu(z6n) &= -\mu(z7n) = a_2 \sin(4n\chi + 3\chi + \delta_2). \end{aligned}$$

В каждой подсистеме позиций, характеризуемой определенным номером  $p$ , реализуется эллиптическая циклоидальная спираль, которую можно назвать ферромагнитной, поскольку ММ атомов становится параллельными при  $\chi = 0$ . Сложную спираль, реализующуюся на одной системе эквивалентных позиций, по аналогичной причине можно назвать антиферромагнитной. Если положить  $a_1 = b_1$ ,  $a_2 = b_2$ ,  $\delta_1 = \delta_2$ , мы приходим к структуре, полностью совпадающей с экспериментально установленной в [7].

В случае  $F' = 4$ , который в принципе может иметь место в кристаллах рассматриваемого типа, следует положить

$$\begin{aligned} \mu(y41) &= ib_1 \exp i\delta_1, & \mu(z41) &= a_1 \exp i\delta_2, \\ \mu(y42) &= ib_2 \exp i\delta_1, & \mu(z42) &= a_2 \exp i\delta_2 \end{aligned}$$

и далее воспользоваться (7).

Работа частично поддержана фондом фундаментальных исследований ГКНТ Украины (грант 2/151).

## Список литературы

- [1] Ковалев О.В. ФНТ **6**, 1, 92 (1980).
- [2] Ковалев О.В. ФТТ **32**, 8, 2381 (1990).
- [3] Ковалев О.В. ФТТ **37**, 11, (1995).
- [4] Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М. (1986). 368 с.
- [5] Ковалев О.В. ФТТ **17**, 6, 1700 (1975).
- [6] Ковалев О.В. ФТТ **36**, 7, 2074 (1994).
- [7] Newnham R.E., Kramer J.J., Schulze W.A., Gross L.E. J. Appl. Phys. **49**, 12, 6088 (1978).