ЖЭТФ, 2005, том 127, вып. 5, стр. 1106 –1112

К ТЕОРИИ ОБМЕННЫХ СПИНОВЫХ СТРУКТУР

А. М. Фарутин[*], *В. И. Марченко*

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 декабря 2004 г.

Выяснены все возможные типы обменного спинового упорядочения в кристаллах, проявляемого в спиновых корреляционных функциях. Рассмотрены некоторые общие свойства макроскопической теории произвольных спиновых структур — вид энергии неоднородности, анизотропии и энергии во внешних полях.

PACS: 75.10.-b

1. ВВЕДЕНИЕ

Андреев и Грищук [1] показали, что в случаях, когда обменные эффекты значительно превышают релятивистские, в конденсированной среде могут возникнуть спиновые структуры особого типа. Средняя микроскопическая спиновая плотность

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \langle \hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}) \rangle, \tag{1}$$

которая характеризует обычные магнетики, при этом равна нулю, и спонтанное нарушение симметрии обменного гамильтониана относительно группы вращений спинового пространства проявляется в возникновении анизотропии у спиновой корреляционной функции

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1) \hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2) \rangle. \tag{2}$$

Такое состояние не является магнетиком, так как не нарушена инвариантность относительно изменения знака времени R. Однако спиновая корреляционная структура обладает многими свойствами, характерными для обычных обменных магнетиков [2] (низкочастотные спиновые волны, магнитный резонанс, анизотропия восприимчивости и т. д.).

В принципе возможны и более сложные структуры, в которых спонтанное нарушение обменной инвариантности и симметрии R проявляется лишь в многоточечных спиновых корреляционных функциях. В случаях четных корреляционных функций состояние немагнитно — такие структуры будем называть спиновыми нематиками [1]. В случае нечетных корреляционных функций, например, в случае отличной от нуля трехточечной корреляционной функции

$$S_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1) \hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2) \hat{S}_\gamma(\mathbf{r}_3) \rangle, \tag{3}$$

состояние является магнетиком, так как симметрия $t \to -t$ нарушена. Такие структуры, характеризуемые нечетными спиновыми корреляционными функциями, будем называть тензорными магнетиками [3, 4]. Они существенно отличаются как от обычных магнетиков, так и от спиновых нематиков. При учете релятивистских эффектов в них обязательно появляется малая спиновая плотность. Недавно было обнаружено несколько веществ, в которых наблюдается крайне слабая спонтанная намагниченность подрешеток. Барзыкин и Горьков [5] предложили способ определения наличия у этих веществ тензорного магнитного порядка с помощью измерения упругого рассеяния нейтронов во внешнем магнитном поле.

В работах [1, 3, 4] были рассмотрены некоторые примеры тензорных структур без анализа трансформационных свойств спинового параметра порядка относительно кристаллографической симметрии. Барзыкин, Горьков и Сокол [6] рассмотрели в рамках теории Ландау некоторые спиновые нематические фазы, характеризуемые парной корреляционной функцией, возникающие в результате фазового перехода второго рода в кристаллах с тетрагональной симметрией.

В настоящей работе, основываясь на общих идеях теории обменной симметрии [2], мы найдем все

[*]E-mail: farutin@kapitza.ras.ru

возможные типы тензорного спинового упорядочения в кристаллах. Так же, как и для обычных магнетиков, эта задача может быть решена без исследования фазовых переходов. Рассмотрим также некоторые особенности теории макроскопических свойств тензорных спиновых структур.

2. ОБМЕННАЯ СИММЕТРИЯ

Симметрия обменного спинового состояния задается совокупностью преобразований трех типов: 1) обычных кристаллографических, 2) их комбинаций с поворотами спинового пространства и преобразованием R (которое играет роль инверсии спинового пространства), а также 3) спиновых поворотов, относительно которых все характеристики спиновой структуры — плотность (1) и любые спиновые корреляционные функции — остаются инвариантными.

Совокупность последних, чисто спиновых, преобразований представляет собой некоторую группу симметрии, которая, очевидно, совпадает с одной из точечных групп симметрии [7]. Будем обозначать эти группы спиновых преобразований так же, как и пространственные точечные группы, но с добавлением верхнего индекса «s». Например, группами спиновой симметрии обычных обменных магнетиков являются группы $C^s_{\infty v}$ — у коллинеарных, C^s_s — у компланарных, E^s — у неколлинеарных некомпланарных структур.

Построение групп обменной симметрии обычных магнетиков основано на следующем замечании [2]. В общем случае микроскопическую спиновую плотность можно записать в виде

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = f_a^{(1)}\mathbf{a} + f_b^{(1)}\mathbf{b} + f_c^{(1)}\mathbf{c}, \tag{4}$$

где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — базис в спиновом пространстве: тройка взаимно ортогональных единичных магнитных векторов, меняющих знак при изменении знака времени; f — вещественные функции координат $\mathbf{r}$, верхний индекс в скобках у функций f указывает ранг рассматриваемого спинового тензора. Квадрат спиновой плотности

$$\mathbf{S}^2 = (f_a^{(1)})^2 + (f_b^{(1)})^2 + (f_c^{(1)})^2 \tag{5}$$

вообще не меняется ни при каких поворотах спинового пространства и изменении знака времени, и как характеристика состояния должен быть инвариантен относительно всех преобразований обменной кристаллической группы симметрии G.

В коллинеарном случае функции f линейно зависимы, базис в спиновом пространстве можно выбрать так, что, например, $f_a^{(1)} = f_b^{(1)} = 0$. Функция $f_c^{(1)}$ должна преобразовываться только по какому-либо одномерному представлению. В компланарном магнетике базис можно выбрать так, что, например, функция $f_c^{(1)}$ будет равна нулю, тогда функции $f_a^{(1)}, f_b^{(1)}$ должны быть линейно независимы и преобразовываться либо по одному и тому же одномерному представлению, либо по разным одномерным представлениям, либо по одному двумерному представлению. В неколлинеарном магнетике общего вида все три функции линейно независимы и должны преобразовываться по одинаковым или различным одномерным представлениям, либо одна по какому-либо одномерному представлению, а две по двумерному, либо все по одному трехмерному представлению.

В перечисленных обменных магнетиках со спиновыми симметриями $C^s_{\infty v}$, C^s_s и E^s задание спиновой плотности полностью определяет симметрию состояния и нет необходимости в специальном рассмотрении корреляционных функций.

Иная ситуация возникает в других группах спиновой симметрии. В случае минимального нарушения группы симметрии обменного гамильтониана, когда все повороты спинового пространства остаются ненарушенными и отсутствует лишь инвариантность $t \to -t$, параметром порядка является трехточечная корреляционная функция

$$S_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = f^{(3-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) E_{\alpha\beta\gamma}, \tag{6}$$

Знак «минус» в верхнем индексе у функции f указывает на то, что речь идет об антисимметричной части спинового тензора. Изотропный тензор $E_{\alpha\beta\gamma}$ равен

$$E_{\alpha\beta\gamma} = a_\alpha b_\beta c_\gamma + b_\alpha c_\beta a_\gamma + c_\alpha a_\beta b_\gamma - \\ - b_\alpha a_\beta c_\gamma - a_\alpha c_\beta b_\gamma - c_\alpha b_\beta a_\gamma.$$

Тензор $E_{\alpha\beta\gamma}$ отличается от псевдотензора Леви-Чевита $e_{\alpha\beta\gamma}$ магнитным множителем

$$\nu = \mathbf{a} \cdot [\mathbf{b} \times \mathbf{c}], \tag{7}$$

меняющим знак при изменении знака времени. Из условия инвариантности спиновых сверток $S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\gamma}$ относительно элементов группы G следует, что функция $f^{(3-)}$ может преобразовываться только по какому-либо одномерному представлению. Вещество является скалярным магнетиком [3]. Обменная и магнитная симметрии такого состояния определяются симметрией произведения $\nu f^{(3-)}$.

Магнитная кристаллическая группа здесь, очевидно, совпадает с обменной кристаллической группой G.

Изотропная магнитная величина (7) отлична от нуля также у неколлинеарных некомпланарных магнетиков, в которых в спиновой плотности (1) все функции f линейно независимы. Эту величину естественно называть магнитной киральностью. Дзялошинский [8] обратил внимание на то, что в таких структурах возможны доменные границы особого рода. Состояния, различающиеся знаком величины (7), не могут быть переведены друг в друга каким-либо поворотом спинового пространства. Таким образом, структура границы между ними определяется обменными взаимодействиями и поэтому должна иметь атомную толщину в отличие от обычных доменных стенок в магнетиках, толщина которых связана с конкуренцией обменных и релятивистских эффектов.

Состояние с максимальной аксиальной спиновой симметрией $\mathbf{D}^s_{\infty h}$ является аксиальным спиновым нематиком [1], который характеризуется анизотропной частью парной корреляционной функции

$$S_{\alpha\beta} = \frac{f_1^{(2)}}{\sqrt{6}}(3c_\alpha c_\beta - \delta_{\alpha\beta}), \tag{8}$$

где $f_1^{(2)}$ — функция координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Из условия инвариантности относительно элементов обменной кристаллографической группы G спиновых сверток $S_{\alpha\beta}S_{\alpha\beta}$ и $S_{\alpha\beta}S_{\beta\gamma}S_{\alpha\beta}$ следует, что функция $f_1^{(2)}$ вообще не может меняться (единичное представление).

Тензорные магнетики со спиновой симметрией $\mathbf{D}^s_\infty$ характеризуются магнитной киральностью (6) и парными корреляциями (8), причем функции $f^{(3-)}$ и $f_1^{(2)}$ могут преобразовываться по одному или по разным одномерным представлениям.

В спиновой группе $\mathbf{C}^s_{\infty h}$ в корреляционной функции, помимо симметричной по спиновым индексам части (8), появляется антисимметричная часть [1]

$$f_c^{(2-)}(a_\alpha b_\beta - b_\alpha a_\beta). \tag{9}$$

Анализ инвариантности немагнитных спиновых сверток и здесь приводит к утверждению, что функция $f_1^{(2)}$ не может меняться, а функция $f_c^{(2-)}$ преобразуется по какому-либо одномерному представлению. Параметром порядка в рассматриваемом случае служит псевдовектор $\mathbf{P}$ в спиновом пространстве, дуальный антисимметричной части корреляционной функции

$$\mathbf{P} = f_c^{(2-)}\mathbf{a} \times \mathbf{b}. \tag{10}$$

В спиновой группе $\mathbf{C}^s_\infty$ помимо корреляционной функции, характеризующей случай $\mathbf{C}^s_{\infty h}$ (с теми же правилами отбора для функций f), разрешен вектор

$$\mathbf{S} = f_c^{(1)}\mathbf{c}, \tag{11}$$

где функции f преобразуются по какому-либо одномерному представлению. Такая структура, очевидно, обладает магнитной киральностью.

В конечных группах выберем ориентацию базисной тройки спиновых векторов следующим образом. В группах $\mathbf{T}^s, \mathbf{T}^s_d, \mathbf{T}^s_h, \mathbf{Y}^s, \mathbf{Y}^s_h$ векторы $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ направим вдоль трех взаимно ортогональных осей второго порядка, в группах $\mathbf{O}^s, \mathbf{O}^s_h$ — вдоль осей четвертого порядка. В группах с выделенной осью вектор $\mathbf{c}$ направим вдоль главной оси. Вектор $\mathbf{a}$ в группах $\mathbf{D}^s_n, \mathbf{D}^s_{nh}, \mathbf{D}^s_{nd}$ направим вдоль одной из осей U^s_2. В группах $\mathbf{C}^s_{nv}$ вектор $\mathbf{a}$ направим в плоскости симметрии σ^s_v. В группах $\mathbf{C}^s_n, \mathbf{C}^s_{nh}, \mathbf{S}^s_{2n}$ ориентация вектора $\mathbf{a}$, а в группе $\mathbf{C}^s_i$ ориентация всей базисной тройки остаются свободными.

В спиновой группе $\mathbf{C}^s_i$ при полном нарушении обменной инвариантности и сохранении $t \to -t$-инвариантности удобно рассмотреть антисимметричную часть парной корреляционной функции, которая в общем случае имеет вид

$$S^{(-)}_{\alpha\beta} = (f_a^{(2-)}a_\gamma + f_b^{(2-)}b_\gamma + f_c^{(2-)}c_\gamma)E_{\alpha\beta\gamma}. \tag{12}$$

Заметим, что при рассматриваемой группе спиновой симметрии $\mathbf{C}^s_i$ нет оснований для линейной зависимости между функциями f. Из условия инвариантности спиновой свертки $S^{(-)}_{\alpha\beta}S^{(-)}_{\alpha\beta}$ следует, что сумма

$$\left(f_a^{(2-)}\right)^2 + \left(f_b^{(2-)}\right)^2 + \left(f_c^{(2-)}\right)^2$$

не меняется под действием элементов симметрии группы G. Таким образом, возникают те же правила отбора для представлений, по которым могут преобразовываться функции f, что и в магнетиках. Здесь, однако, есть еще требование инвариантности свертки $S^{(-)}_{\alpha\beta}S^{(-)}_{\beta\gamma}S^{(-)}_{\alpha\gamma}$, откуда следует дополнительное условие — не должно меняться произведение $f_a^{(2-)}f_b^{(2-)}f_c^{(2-)}$. Последнее условие существенно сокращает число возможных структур.

В группах $\mathbf{C}^s_n$, $\mathbf{C}^s_{nv}$ $(n > 1)$ разрешен коллинеарный магнетизм (11). В группах $\mathbf{C}^s_n$ спиновая структура характеризуется магнитной киральностью и, соответственно, парная корреляционная функция имеет антисимметричную часть (9). В группе $\mathbf{C}^s_2$ в корреляционной функции $S_{\alpha\beta}$ появляются дополнительные члены

$$\frac{f_2^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta) + \frac{f_3^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha b_\beta + b_\alpha a_\beta) \tag{13}$$

Из анализа спиновых сверток следует, что функции $f_2^{(2)}$, $f_3^{(2)}$ преобразуются либо по одномерным представлениям (различным или одинаковым), либо по одному двумерному. В группе $\mathbf{C}_{2v}^s$ из двух членов выражения (13) остается лишь первый, преобразующийся по единичному представлению.

Правила отбора представлений в группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nv}^s$ при $n > 2$ такие же, как и при $n = 2$, только анизотропия проявляется в n-точечных корреляторах. При этом вместо пары тензоров, фигурирующих в выражении (13), нужно рассматривать пару спиновых тензоров ранга n, которые можно представить в виде

$$\{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}, \quad i\{(a+ib)^n - (a-ib)^n\}.$$

Здесь и ниже запись выражений в скобках { } подразумевает очевидную расстановку спиновых индексов.

Спиновые структуры с группами спиновой симметрии $\mathbf{C}_{nh}^s$ отличаются от случаев $\mathbf{C}_n^s$ лишь отсутствием магнитного вектора (11).

В группах $\mathbf{S}_{2n}^s$ магнитный вектор также запрещен, но имеется антисимметричная часть парной корреляционной функции (9). Анизотропия вокруг оси проявляется в корреляционной функции порядка $n+3$. Имеются два тензора $E_{\alpha\beta\gamma} * \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}$ и $iE_{\alpha\beta\gamma} * \{(a+ib)^n - (a-ib)^n\}$, где знак «$*$» указывает на тензорное произведение. Здесь также возможны случаи одномерных и двумерных представлений для соответствующих амплитуд $f_1^{(n+3)}, f_2^{(n+3)}$.

В группах $\mathbf{D}_n^s$ нарушение инвариантности $t \to -t$ приводит к наличию изотропных тройных корреляций (6).

В случае $\mathbf{D}_2^s$ анизотропия в спиновом пространстве описывается корреляционной функцией

$$S_{\alpha\beta} = \frac{f_1^{(2)}}{\sqrt{6}}(3c_\alpha c_\beta - \delta_{\alpha\beta}) + \frac{f_2^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta). \quad (14)$$

Из условия инвариантности всевозможных спиновых сверток приходим к заключению, что функции $(f_1^{(2)})^2 + (f_2^{(2)})^2$ и $(f_1^{(2)})^3 - 3f_1^{(2)}(f_2^{(2)})^2$ должны быть инвариантами. В любой пространственной группе G функция $f_1^{(2)}$ может преобразовываться по единичному представлению, а $f_2^{(2)}$ — по какому-либо одномерному представлению. Возможны, однако, и случаи двумерных представлений. Так, в кристаллах ромбоэдрической и гексагональной систем имеются представления с $\mathbf{k} = 0$, сохраняющие инвариантность полинома

$$(f_1^{(2)})^3 - 3f_1^{(2)}(f_2^{(2)})^2 = \mathrm{Re}(f_1^{(2)} + if_2^{(2)})^3.$$

Таковым, например, в любой пространственной группе симметрии кристаллического класса C_3 является представление, по которому преобразуются x, y-компоненты векторов.

Несложный анализ показывает, что в группах с выделенной осью более высокого порядка, а также в тетраэдрических группах возникают корреляционные функции, задаваемые одним тензором или двумя тензорами различного ранга с амплитудами, преобразующимися только по одномерным представлениям группы G. Тензорные параметры порядка здесь имеют вид

$\mathbf{D}_n^s : E_{\alpha\beta\gamma}, \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}$;
$\mathbf{D}_{nh}^s : \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}$;
$\mathbf{D}_{nd}^s : E_{\alpha\beta\gamma} * \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}$;
$\mathbf{T}^s : E_{\alpha\beta\gamma}, T_{\alpha\beta\gamma}$;
$\mathbf{T}_d^s : T_{\alpha\beta\gamma}$;
$\mathbf{T}_h^s : E_{\alpha\beta\gamma} * T_{\delta\eta\mu}$.

Здесь $T_{\alpha\beta\gamma}$ — тетраэдрический тензор

$$\{abc\} = a_\alpha b_\beta c_\gamma + b_\alpha c_\beta a_\gamma + c_\alpha a_\beta b_\gamma + b_\alpha a_\beta c_\gamma + \\ + a_\alpha c_\beta b_\gamma + c_\alpha b_\beta a_\gamma.$$

В октаэдрической группе спиновой симметрии $\mathbf{O}^s$ имеются трехточечные корреляции (6). Амплитуда $f^{(3-)}$ может преобразовываться по какому-либо одномерному представлению. Анизотропия в спиновом пространстве проявляется в четырехточечной корреляционной функции вида $f^{(4)}O_{\alpha\beta\gamma\delta}$, где величина $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$ — симметричный по всем индексам бесследовый тензор с кубической симметрией

$$O_{\alpha\beta\gamma\delta} = a_\alpha a_\beta a_\gamma a_\delta + b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta + c_\alpha c_\beta c_\gamma c_\delta - \frac{1}{5}I_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}.$$

Здесь тензор $I^{(4)}$ есть симметричный тензор четвертого ранга, обладающий сферической симметрией:

$$I_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}.$$

Амплитуда $f^{(4)}$ должна быть инвариантом группы G, так как не равна нулю свертка $O_{\alpha\beta\gamma\delta}O_{\alpha\beta\mu\nu}O_{\gamma\delta\mu\nu}$.

В кубической группе $\mathbf{O}_h^s$ параметром порядка является тензор $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

В икосаэдрической группе $\mathbf{Y}^s$ имеются трехточечные корреляции (6), а анизотропия в спиновом пространстве проявляется лишь в 6-точечной корреляционной функции вида $f^{(6)}Y_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu}$, где тензор Y имеет симметрию икосаэдра. В группе $\mathbf{Y}_h^s$ параметром порядка служит только тензор Y. Симметричный по всем индексам бесследовый тензор 6-го ранга, обладающий икосаэдрической симметрией, имеет следующий вид

$$Y = \Big\{(c+\phi a)^6+(c-\phi a)^6+(a+\phi b)^6+(a-\phi b)^6+ \\ + (b+\phi c)^6 + (b-\phi c)^6 - \frac{2(1+\phi^2)^3}{35} I^{(6)}\Big\}.$$

Здесь векторы $\mathbf{c}+\phi\mathbf{a}$, $\mathbf{c}-\phi\mathbf{a}$, $\mathbf{a}+\phi\mathbf{b}$, $\mathbf{a}-\phi\mathbf{b}$, $\mathbf{b}+\phi\mathbf{c}$, $\mathbf{b}-\phi\mathbf{c}$ — радиус-векторы шести вершин икосаэдра, никакие две из которых не являются диаметрально противоположными. При этом икосаэдр оказывается обычным образом вписан в куб с ребрами, равными двум и ориентированными вдоль базисной тройки $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$. Число ϕ равно $(\sqrt{5}-1)/2$. Тензор $I^{(6)}$ есть симметричный тензор шестого ранга, обладающий сферической симметрией:

$$I^{(6)}_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu} = \delta_{\alpha\beta} I^{(4)}_{\gamma\delta\mu\nu} + \delta_{\alpha\gamma} I^{(4)}_{\beta\delta\mu\nu} + \delta_{\alpha\delta} I^{(4)}_{\beta\gamma\mu\nu} + \\ + \delta_{\alpha\mu} I^{(4)}_{\beta\gamma\delta\nu} + \delta_{\alpha\nu} I^{(4)}_{\beta\gamma\delta\mu}.$$

В обоих икосаэдрических спиновых группах функция $f^{(6)}$ должна быть инвариантом группы G, так как не равна нулю кубическая свертка $Y_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu} Y_{\alpha\beta\gamma\varepsilon\zeta\xi} Y_{\delta\eta\mu\varepsilon\zeta\xi}$.

Отметим, что тетраэдрический, кубический и икосаэдрический тензоры в другом виде приведены в работах по теории неаксиальных нематических жидких кристаллов (см., например, [9]).

3. ИНВАРИАНТЫ ЛИФШИЦА

Однородное состояние спиновой структуры неустойчиво, если его симметрия допускает наличие обменных инвариантов Лифшица. Эти опасные инварианты имеют вид спиновых сверток полиномов от компонент $a_\alpha, b_\beta, c_\gamma$ и пространственных производных $\partial_i a_\alpha$, $\partial_i b_\beta$, $\partial_i c_\gamma$. Поскольку свертка двух базисных векторов есть либо 0, либо 1, эти инварианты сводятся к совокупности членов вида $\tilde{a}_\alpha \partial_i \tilde{b}_\alpha$, где $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}}$ некоторые векторы из базисной тройки.

При бесконечно малом повороте спинового пространства на угол $\delta\boldsymbol{\theta}$ любой вектор $\tilde{\mathbf{a}}$ изменяется на величину

$$\delta\tilde{\mathbf{a}} = \delta\boldsymbol{\theta} \times \tilde{\mathbf{a}}. \tag{15}$$

Поэтому линейная по градиентам часть энергии сводится к выражению $L_{i\alpha}\theta_{i\alpha}$, где $L_{i\alpha}$ — матрица, являющаяся вектором в орбитальном пространстве и псевдовектором в спиновом пространстве, а

$$\theta_{i\alpha} = \frac{\delta\theta_\alpha}{dx_i}. \tag{16}$$

По аналогии с терминологией теории упругости твердого тела естественно называть величину $\theta_{i\alpha}$ угловой дисторсией (или ориентационной деформацией). Дисторсия $\theta_{i\alpha}$ есть именно псевдовектор в спиновом пространстве, поскольку из формулы (15) очевидно, что $\delta\boldsymbol{\theta}$ — спиновый псевдовектор (не меняется при изменении знака времени).

Матрица $L_{i\alpha}$ является характеристикой состояния спиновой системы. Поскольку она уже не зависит от пространственных градиентов, она должна иметь симметрию однородного спинового состояния. Очевидно, что матрица $L_{i\alpha}$ отлична от нуля только в конечных группах спиновой симметрии и только в случаях, когда разрешена антисимметричная часть парной корреляционной функции, причем функции $f^{(2-)}$ должны преобразовываться по векторному представлению группы G.

4. ЭНЕРГИЯ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

Во всех аксиальных спиновых структурах обменная энергия при слабой пространственной неоднородности ориентации параметра порядка имеет обычный вид

$$\frac{1}{2}\Lambda_{ij}\partial_i \mathbf{c}\partial_j \mathbf{c}, \tag{17}$$

где тензор Λ инвариантен относительно группы G.

В общем случае неаксиальных структур квадратичная по градиентам углов спинового поворота обменная энергия равна

$$\frac{1}{2}\Lambda_{ij\alpha\beta}\theta_{i\alpha}\theta_{j\beta}, \tag{18}$$

где матрица Λ является симметричным тензором в орбитальном пространстве и симметричным тензором в спиновом пространстве. Очевидно, что, так же как и матрица $L_{i\alpha}$, матрица Λ инвариантна относительно обменной группы симметрии исследуемого состояния.

В тетраэдрических, кубических и икосаэдрических группах спиновой симметрии матрица $\Lambda_{ij\alpha\beta}$ сводится к простому виду

$$\Lambda^{(0)}_{ij}\delta_{\alpha\beta}, \tag{19}$$

где пространственный тензор $\Lambda^{(0)}_{ij}$ инвариантен относительно обменной кристаллической группы G. Этот вклад, очевидно, присутствует в энергии неоднородности любой спиновой структуры.

В группах спиновой симметрии с выделенной осью $\mathbf{D}_n^s, \mathbf{D}_{nh}^s, \mathbf{D}_{nd}^s$ при $n > 2$ возникает дополнительный вклад

$$\Lambda_{ij}^{(1)} c_\alpha c_\beta, \tag{20}$$

где тензор $\Lambda_{ij}^{(1)}$ также инвариантен относительно группы G. Такова же ситуация в группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nv}^s, \mathbf{C}_{nh}^s, \mathbf{S}_{2n}^s$ при $n > 2$ в случаях, когда корреляционная функция порядка n (или $n+3$) определяется одной функцией координат, преобразующейся по одномерному представлению группы G.

В остальных неаксиальных спиновых структурах, так же как и в неколлинеарных магнетиках [2], для определения вида матрицы Λ необходим специальный анализ в каждом конкретном случае.

5. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ АНИЗОТРОПИИ

Релятивистские спин-орбитальные и магнитные диполь-дипольные эффекты приводят к зависимости энергии кристалла от ориентации спиновых структур относительно кристаллографических осей.

Как это принято, например, в теории фазовых переходов второго рода, удобно перенести законы преобразования относительно элементов симметрии кристаллографической группы G с функций f^n на сами спиновые векторы и тензоры. Тогда параметром порядка в антиферромагнетиках будут единичные антиферромагнитные векторы $\mathbf{l}_i$ [2]. Лишь в случае, когда разрешена намагниченность $\mathbf{M}$, не единичный вектор $\mathbf{M}/|\mathbf{M}|$, а саму намагниченность удобно считать параметром порядка, поскольку она входит в уравнения Максвелла. В случаях же тензорных структур параметрами порядка будут служить выписанные выше тензоры с постоянными в пространстве амплитудами. В частности, при наличии корреляции (6) в качестве параметра порядка можно выбрать единичную киральность ν, меняющую знак как при изменении знака времени, так и при некоторых кристаллических преобразованиях (в согласии с законом преобразовании функции $f^{(3-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$).

В обычных магнетиках энергия анизотропии сводится к разложению по компонентам магнитных векторов. Параметром разложения служит постоянная тонкой структуры α. В коллинеарных магнетиках первый член разложения, например в одноосном кристалле, можно записать как $\beta^{[2]} l_z^2$. Константа анизотропии $\beta^{[2]}$ имеет малость α^2 по сравнению с характерной объемной плотностью обменной энергии. Здесь и ниже верхний индекс в квадратных скобках у констант анизотропии указывает на степень малости по постоянной тонкой структуры. Следующий член разложения в одноосном случае равен $\beta^{[4]} l_z^4$, где константа $\beta^{[4]}$ имеет малость α^4. Вообще разложение энергии анизотропии коллинеарного магнетика содержит только четные степени n компонент магнитного вектора и степень малости соответствующих констант есть α^n. Такая же ситуация наблюдается и в энергии анизотропии неколлинеарных компланарных магнетиков — спиновых структурах с двумя векторами. В неколлинеарных некомпланарных магнетиках могут возникнуть особые члены спин-орбитальной природы. Например, в так называемом неупорядоченном антиферромагнетике, где параметром порядка являются три спиновых вектора $S_x^\alpha, S_y^\beta, S_z^\gamma$, где нижние индексы указывают на то, что тройка спиновых векторов преобразуется по векторному представлению в орбитальном пространстве, помимо обычных релятивистских членов

$$\beta_1^{[2]} (S_i^i)^2 + \beta_2^{[2]} S_i^k S_k^i, \tag{21}$$

приведенных в работе [2], следует учесть еще дополнительный член

$$\beta_3^{[2]} \nu S_i^i. \tag{22}$$

Микроскопически этот член обусловлен обменным и спин-орбитальным взаимодействиями и имеет ту же, что и у членов (21), малость по постоянной тонкой структуры α^2. Заметим, что указанный аномальный член, очевидно, становится малым по сравнению с обычными (21) вблизи фазового перехода второго рода в парамагнитное состояние, когда все компоненты параметра порядка стремятся к нулю.

Из изложенных соображений следует общее правило для релятивистских членов разложения по компонентам произвольного спинового параметра порядка. Релятивистские инварианты с четным количеством спиновых индексов n имеют малость α^n. Инварианты же с нечетным количеством индексов имеют малость α^{n+1}.

Поскольку все возможные перечисленные выше спиновые параметры порядка устроены так, что при спиновых свертках их степеней невозможно получить неизотропные или неаксиальные тензоры более низкого ранга, эффекты анизотропии, а также ориентирующее воздействие на параметр порядка магнитных и электрических полей и однородных деформаций кристалла проявляются в полной мере лишь в членах достаточно высокого порядка по постоянной тонкой структуры и по амплитуде внешних воздействий.

Рассмотрим два примера — тетраэдрический тензорный магнетик со спиновой симметрией $\mathbf{T}_d^s$ и кубический спиновый нематик $\mathbf{O}_h^s$ в кристаллах с обменным кристаллическим классом $\mathbf{D}_{2h}$.

В обоих случаях первые члены разложения энергии анизотропии по релятивистским эффектам имеют одинаковый вид $\beta_1 S_{zzzz} + \beta_2 S_{xxxx} + \beta_3 S_{yyyy} + \beta_4 S_{xxyy} + \beta_5 S_{yyzz} + \beta_6 S_{zzxx}$, где тензор S имеет кубическую симметрию и в кубическом случае равен $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$, а в тетраэдрическом $S_{\alpha\beta\gamma\delta} = T_{\alpha\beta\mu}T_{\mu\gamma\delta}$. Обратим внимание на то, что, в отличие от обычных магнетиков с кристаллическим классом симметрии $\mathbf{D}_{2h}$, здесь анизотропия возникает не во втором, а в четвертом порядке по постоянной тонкой структуры.

Во внешнем магнитном поле анизотропия спиновой структуры проявляется в членах обменной природы, пропорциональных $S_{\alpha\beta\gamma\delta}H_\alpha H_\beta H_\gamma H_\delta$, и в смешанных обменно-релятивистских членах

$$\eta_1 S_{\alpha\beta xx} H_\alpha H_\beta + \eta_2 S_{\alpha\beta yy} H_\alpha H_\beta + \eta_3 S_{\alpha\beta zz} H_\alpha H_\beta.$$

В тетраэдрическом случае, когда функция f^3 преобразуется по единичному представлению, имеются аномальные члены: обменный, пропорциональный $T_{\alpha\beta\gamma}H_\alpha H_\beta H_\gamma$, и обменно-релятивистские

$$\zeta_1 T_{\alpha xx} H_\alpha + \zeta_2 T_{\alpha yy} H_\alpha + \zeta_3 T_{\alpha zz} H_\alpha.$$

Как показали Дзялошинский и Манько [10], члены такого типа могут возникать в неколлинеарных некомпланарных магнетиках.

Благодарим А. Ф. Андреева, Л. А. Мельниковского, Л. А. Прозорову и А. И. Смирнова за полезное обсуждение. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-02-17294) и в рамках президентской программой научных школ.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, И. А. Грищук, ЖЭТФ **84**, 87 (1984).
2. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, УФН **130**, 39 (1980).
3. В. И. Марченко, Письма в ЖЭТФ **48**, 387 (1988).
4. В. И. Марченко, Письма в ЖЭТФ, **59**, 590 (1994).
5. V. Barzykin and L. P. Gorkov, Phys. Rev. Lett. **70**, 2479 (1992).
6. V. Barzykin, L. P. Gorkov, and A. V. Sokol, Europhys. Lett. **15**, 869 (1991).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
8. И. Е. Дзялошинский, Письма в ЖЭТФ **25**, 442 (1977).
9. L. G. Fel, Phys. Rev. E **52**, 2692 (1995).
10. И. Е. Дзялошинский, В. И. Манько, ЖЭТФ **46**, 1352 (1964).