

МАГНИТНОЕ И СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ УПОРЯДОЧЕНИЯ В ОКСИДЕ BiMn_2O_5

*В. В. Меньшенин**

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 15 июля 2015 г.

Проведен теоретико-групповой анализ магнитной фазы оксида BiMn_2O_5 с помощью пространственной группы симметрии соединения. Используя метод проекционных операторов, мы нашли базисные функции неприводимого представления пространственной группы, выраженные через компоненты магнитных векторов, по которому могут происходить два близких по температуре фазовых переходов из парамагнитного состояния в антиферромагнитную фазу с упорядочением спинов ионов марганца в двух кристаллографических позициях. На основе ренормгруппового анализа этих переходов установлено, что при их реализации как переходов второго рода электрическая поляризация в системе не появляется, так как спиновые флуктуации в этом случае повышают симметрию системы. Поляризация возникает, когда спиновые флуктуации приводят к тому, что хотя бы один из этих переходов становится переходом первого рода.

DOI: 10.7868/S0044451016010156

1. ВВЕДЕНИЕ

Материалы, в которых в определенных температурных интервалах сосуществует несколько параметров дальнего порядка различной физической природы, интенсивно исследуются в последние годы. К таким материалам относятся, например, мультиферроики, где одновременно могут существовать дальний магнитный и сегнетоэлектрический порядок [1]. Поскольку в мультиферроиках удается управлять магнитным состоянием с помощью электрического поля, а электрической поляризацией с помощью магнитного поля [2], эти соединения представляют интерес для прикладных разработок. Особые усилия направлены на поиск материалов, в которых связь между магнитной и сегнетоэлектрической подсистемами является сильной. Модельным классом таких систем являются оксиды RMn_2O_5 (R — редкоземельный ион, V , Y), в которых электрическая поляризация возникает только после появления дальнего магнитного порядка [3].

Экспериментально обнаружено, что сегнетоэлектрический дальний порядок появляется в системе только тогда, когда редкоземельный элемент оказы-

вается тяжелее неодима [3]. Более того, сегнетоэлектрический порядок появляется в несоизмеримой по одному направлению магнитной структуре и достигает максимального значения в соизмеримой антиферромагнитной фазе [3–5].

С другой стороны, если переход из парамагнитного состояния происходит в соизмеримую магнитную структуру, то ситуация не так однозначна. Так, в соединении PrMn_2O_5 переход происходит в фазу с волновым вектором $\mathbf{k} = (1/2, 0, 0)$ [6], тогда как в соединении BiMn_2O_5 переход осуществляется в фазу $\mathbf{k} = (1/2, 0, 1/2)$ [7]. Однако в оксиде PrMn_2O_5 электрической поляризации нет, тогда как в BiMn_2O_5 она появляется. При этом неприводимые представления пространственной группы $Pbam$ парамагнитной фазы для указанных волновых векторов совпадают [8]. Этих представлений два. Ниже будет показано, что переходы в этих соединениях происходят по разным неприводимым представлениям. Это обстоятельство кардинально влияет на условия возникновения дальнего сегнетоэлектрического порядка.

В работе [9] было установлено, что переход из парамагнитного состояния в соизмеримую магнитную структуру в соединении PrMn_2O_5 происходит по представлению ν_2 группы $Pbam$, соответствующему волновому вектору $\mathbf{k} = (1/2, 0, 0)$. Это представление является двумерным [8]. В эффективном

* E-mail: menshenin@imp.uran.ru

гамильтониане, описывающем этот переход, невозможно найти инварианты, включающие электрическую поляризацию и компоненты двумерного параметра порядка. Этот переход оказывается переходом второго рода, в точке которого, благодаря флуктуациям, симметрия оказывается выше симметрии эффективного гамильтониана [9].

В связи со сказанным выше интересно проанализировать аналогичный переход в соединении BiMn_2O_5 и выяснить, почему в этом случае дальний сегнетоэлектрический порядок возникает.

2. МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В ОКСИДЕ BiMn_2O_5

В работе [7] было обнаружено, что при низких температурах магнитная восприимчивость оксида BiMn_2O_5 растет с понижением температуры и имеет широкий максимум с двумя характерными температурами при $T = 39$ К и $T = 36$ К, указывая на появление дальнего магнитного порядка. Существование второго перехода означает наличие малой задержки в упорядочении магнитных моментов, связанных с одной из марганцевых позиций, относительно второй позиции. В температурном изменении удельной теплоемкости имеется острая аномалия вблизи температуры упорядочения $T = 39$ К. После выделения магнитного вклада в удельную теплоемкость было определено изменение энтропии, связанное с магнитным переходом. Однако скрытая теплота перехода не была найдена.

Магнитные рефлексы нейтронных пиков описываются волновым вектором $\mathbf{k} = \{1/2, 0, 1/2\}$. Найдено [7], что наилучшее согласие с экспериментальными данными по интенсивности рассеяния нейтронов получается, когда магнитный порядок характеризуется набором $(M_{hx}, C_y, 0)$ для позиции $4h$ (ионы Mn^{3+}) и $(G_x^*, A_y^*, 0)$ для позиции $4f$ (ионы Mn^{4+}), где

$$\begin{aligned} A_y^* &= S_{5y} - S_{6y} - S_{7y} + S_{8y}, \\ G_x^* &= S_{5x} - S_{6x} + S_{7x} - S_{8x}, \\ M_{hx} &= S_{1x} + S_{2x} + S_{3x} + S_{4x}, \\ C_y &= S_{1y} + S_{2y} - S_{3y} - S_{4y}, \end{aligned} \quad (1)$$

где индекс $i = 1, \dots, 4$ нумерует позиции ионов Mn^{3+} , индекс $j = 5, 6, 7, 8$ — позиции ионов Mn^{4+} , \mathbf{S}_i — магнитные моменты, локализованные на ионах Mn^{3+} , \mathbf{S}_j — на ионах Mn^{4+} , а направление осей x, y, z совпадает с выбором осей a, b, c в интернациональной установке пространственной группы $Pbam$.

Рассмотрим состояние магнитной фазы, возникающей при переходе из парамагнитного состояния, принимая во внимание пространственную группу симметрии $Pbam$. В обозначениях монографии [8] для этой пространственной группы упомянутая выше звезда волнового вектора есть $\mathbf{k}_{24} = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3)/2$, где $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_3$ — векторы обратной решетки. Эта звезда однолучевая, так как все элементы нулевого блока пространственной группы (трансляции, кратные векторам обратной решетки, у этих элементов равны нулю) переводят вектор \mathbf{k} в сам этот вектор, или в вектор $-\mathbf{k} + \mathbf{b}$, где \mathbf{b} — также некоторый вектор обратной решетки. Для этой звезды волнового вектора пространственная группа имеет два неприводимых представления (НП). Матрицы малых НП группы волнового вектора, равные [10]

$$d^{k\nu}(g) = d_{pr}^{\nu}(h) \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_h\}, \quad (2)$$

где $d_{pr}^{\nu}(h)$ — матрицы проективных представлений для элемента пространственной группы $g = (h|\boldsymbol{\tau}_h)$ в обозначениях Вигнера–Зейтца, в котором h — поворотная часть, а $\boldsymbol{\tau}_h$ — его нетривиальная трансляция, приведены в таблице. Эти матрицы записаны в о вещественной форме после проведения унитарного преобразования вида [10]

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+i & -1+i \\ 1-i & -1-i \end{bmatrix}, \\ U^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1-i & 1+i \\ -1-i & -1+i \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3)$$

В таблице поворотная часть элементов g_2, g_3, g_4 так же, как и в работе [9], является поворотом на 180° относительно осей соответственно x, y, z , элемент g_{25} есть пространственная инверсия. Элементы группы g_{26}, g_{27}, g_{28} представляют собой отражения в плоскостях, перпендикулярных осям x, y, z , с учетом соответствующих нетривиальных трансляций. Отметим, что для сравнения с соединением PrMn_2O_5 нам удобно использовать матрицы этих представлений, найденные в работе [9] и приведенные еще раз в таблице, которые отличаются от представленных в работе [7] вследствие различного выбора матриц унитарного преобразования (3).

Воспользуемся теперь процедурой определения атомных магнитных моментов соединения, допускаемых НП пространственной группы [10], данных в таблице. Используя эту процедуру, найдем, что магнитные структуры (1) могут реализоваться только для представления ν_1 . Однако из этой процедуры

Таблица. Малые неприводимые представления группы волнового вектора $\mathbf{k} = \{1/2, 0, 1/2\}$ пространственной группы $Pbam$

	g_2	g_3	g_4	g_{25}	g_{26}	g_{27}	g_{28}
ν_1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
ν_2	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

невозможно определить, каким образом эти атомные магнитные моменты преобразуются под действием матриц, осуществляющих это представление. Наборы базисных функций, преобразующихся по этому представлению, можно найти с помощью техники проекционных операторов [11, 12], проектирующих магнитное представление пространственной группы [10] на НП ν_1 . При этом в качестве базисных векторов магнитного представления выбираем векторы $\Sigma_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{s}_i$ [9, 10, 13]. В последнем равенстве \mathbf{e}_i есть ($i = 1, \dots, 4$)-четырёхкомпонентный вектор, у которого все компоненты равны нулю за исключением компоненты i равной единице, указывающей на позицию атома в ячейке, а \mathbf{s}_i — единичный вектор, указывающий ориентацию спина на ионе Mn в позиции i , \otimes — знак прямого произведения векторов. Отметим, что базисные векторы магнитного представления в данной записи относятся к нулевой ячейке кристалла. Определив таким образом базисные векторы НП ν_1 , видим, что наборы $(M_{hx}, C_y, 0)$ и $(G_x^*, A_y^*, 0)$ входят в следующие базисные функции: (C_x, M_{hx}) , (M_{hy}, C_y) , (A_x^*, G_x^*) , (G_y^*, A_y^*) , отличающиеся от найденных в работе [7] перестановкой столбцов. Поскольку, по мнению авторов работы [7], упорядочение спинов ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} происходит при разных температурах, параметры порядка (η_1, η_2) и (ζ_1, ζ_2) соответственно для указанных ионов можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} C_x \\ M_{hx} \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} M_{hy} \\ C_y \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} A_x^* \\ G_x^* \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} G_y^* \\ A_y^* \end{pmatrix},$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ — произвольные константы.

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Компоненты параметров порядка, выписанные в равенствах (4), преобразуются по матрицам представления ν_1 при преобразованиях пространственной группы. Эффективный гамильтониан, позволяющий описывать два наблюдавшихся в эксперименте фазовых перехода, имеет вид

$$\begin{aligned} H_{eff} = \int d^d x \left\{ \left[\frac{r_1}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \eta_1}{\partial x_i} \frac{\partial \eta_1}{\partial x_i} + \frac{\partial \eta_2}{\partial x_i} \frac{\partial \eta_2}{\partial x_i} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + u_1 (\eta_1^4 + \eta_2^4) + u_2 (\eta_1^2 \eta_2^2) + \frac{1}{2\kappa} P_y^2 + \lambda_1 P_y (\eta_1^2 - \eta_2^2) \right] + \right. \\ \left. + \left[\frac{r_2}{2} (\zeta_1^2 + \zeta_2^2) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \zeta_1}{\partial x_i} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x_i} + \frac{\partial \zeta_2}{\partial x_i} \frac{\partial \zeta_2}{\partial x_i} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + u_3 (\zeta_1^4 + \zeta_2^4) + u_4 (\zeta_1^2 \zeta_2^2) + \lambda_2 P_y (\zeta_1^2 - \zeta_2^2) \right] + \right. \\ \left. + u_5 (\eta_1^2 \zeta_1^2 + \eta_2^2 \zeta_2^2) + u_6 \eta_1 \eta_2 \zeta_1 \zeta_2 + u_7 (\eta_1^2 \zeta_2^2 + \eta_2^2 \zeta_1^2) \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

В этом эффективном гамильтониане d — размерность пространства, κ — диэлектрическая восприимчивость, три последних слагаемых описывают взаимодействие параметров порядка двух близких друг к другу по температуре переходов. Обратим внимание на то, что в эффективном гамильтониане содержатся слагаемые, включающие электрическую поляризацию P_y , ориентированную вдоль оси y оксида, которые не появляются при переходе по представлению ν_2 . Видно, что поляризация появляется как сопутствующий параметр порядка и может возникнуть только после появления в системе дальнего магнитного порядка. Таким образом, более сложное по структуре магнитное упорядочение в соединении $BiMn_2O_5$ по сравнению с оксидом $PtMn_2O_5$ обеспечивает появление сегнетоэлектрического порядка в манганате висмута.

Отметим, что в работе [14] также проводился симметричный анализ магнитной фазы соединения ViMn_2O_5 . Было приведено, в частности, слагаемое термодинамического потенциала, описывающее взаимодействие между электрической поляризацией и магнитной подсистемой, вида $-\lambda P_y (\eta_1^2 - \eta_2^2)$, где величины η_1, η_2 — компоненты параметра порядка магнитной фазы. При этом предполагалось, что магнитное упорядочение ионов Mn происходит при одной и той же температуре. Однако инвариант, учитывающий взаимодействие двух подсистем этих ионов, представленный в работе [14], отличается от членов, приведенных в эффективном гамильтониане (5). Связано это с тем, что компоненты базисных функций для ионов Mn^{4+} , приведенные в [14], имеют разные знаки, а следовательно, не совпадают с базисными функциями, приведенными в работе [7] и найденными здесь. Формально, по нашему мнению, различие связано с тем, что для матриц $T^{\nu_1}(g)$ представления ν_1 , приведенных в [14], не выполняются равенства

$$\begin{aligned} T^{\nu_1}(g_2)T^{\nu_1}(g_4) &= T^{\nu_1}(g_3), \\ T^{\nu_1}(g_3)T^{\nu_1}(g_4) &= T^{\nu_1}(g_2), \\ T^{\nu_1}(g_2)T^{\nu_1}(g_{25}) &= T^{\nu_1}(g_{26}), \\ T^{\nu_1}(g_3)T^{\nu_1}(g_{25}) &= T^{\nu_1}(g_{27}), \end{aligned} \quad (6)$$

которые должны иметь место для элементов группы P_{6mm} .

Эффективный гамильтониан должен содержать еще одно слагаемое:

$$\int d^d x \lambda P_y (\eta_1(x)\zeta_1(x) - \eta_2(x)\zeta_2(x)), \quad (7)$$

учитывающее влияние электрической поляризации на взаимодействие ионов марганца в разных кристаллографических позициях. Однако ввиду малости такого влияния этим слагаемым можно пренебречь.

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

В рассматриваемом приближении полагаем размерность пространства $d = 3$. Тогда эффективный гамильтониан совпадает с термодинамическим потенциалом Φ при исключении градиентных членов. Из условий минимума термодинамического потенциала

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta_i} &= 0 \quad (i = 1, 2), \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta_j} &= 0 \quad (j = 1, 2), \quad \frac{\partial \Phi}{\partial P_y} = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

получим систему четырех нелинейных уравнений, решение которой нам не удалось найти, когда все

параметры u_i ($i = 1, \dots, 7$) отличны от нуля. Рассмотрим поэтому частный случай, когда $u_6 = 0$. В этой ситуации решение системы уравнений легко находится. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} \eta_i^2 &= \Delta_i^{(\eta)} / \Delta \quad (i = 1, 2), \\ \zeta_j^2 &= \Delta_j^{(\zeta)} / \Delta \quad (j = 1, 2), \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta &= 16 \{ (2u_1 + u_2)(2u_3 + u_4) - (u_5 + u_7)^2 \}, \\ \Delta_1^{(\eta)} &= \Delta_2^{(\eta)} = \\ &= 16 \{ [-r_1(2u_3 + u_4) + r_2(u_5 + u_7)] \}, \\ \Delta_1^{(\zeta)} &= \Delta_2^{(\zeta)} = \\ &= 16 \{ [-r_2(2u_1 + u_2) + r_1(u_5 + u_7)] \}. \end{aligned} \quad (10)$$

В этом случае необходимым условием существования переходов второго рода является выполнение неравенства

$$(2u_1 + u_2)(2u_3 + u_4) > (u_5 + u_7)^2. \quad (11)$$

В противоположном случае рассматриваемые переходы будут первого рода.

Отметим важное обстоятельство. Выражение для электрической поляризации имеет вид

$$P_y = -\lambda_1 \kappa (\eta_1^2 - \eta_2^2) - \lambda_2 \kappa (\zeta_1^2 - \zeta_2^2). \quad (12)$$

Из полученного решения следует, что при $u_6 = 0$ электрическая поляризация в системе не возникает при появлении дальнего порядка в результате фазовых переходов второго рода, поскольку компоненты параметров порядка попарно равны между собой. Таким образом, для возникновения поляризации обязательным условием является отличие от нуля параметра взаимодействия u_6 . Далее из этих решений следует также, что как для первого, так и для второго перехода отличны от нуля обе компоненты параметра порядка, что не согласуется с экспериментально наблюдаемым магнитным упорядочением, для которого должно выполняться требование $\eta_1 = 0, \eta_2 \neq 0$ и $\zeta_1 = 0, \zeta_2 \neq 0$.

5. КРИТИЧЕСКАЯ ОБЛАСТЬ

В этой области мы полагаем, что существенны флуктуации параметров порядка как первого, так и второго перехода, поскольку $r_1 \approx r_2$. Используем для исследования критической области подход ренормализационной группы [15–17]. В этой области в однопетлевом приближении система уравнений для

величин u_i ($i = 1, \dots, 7$), описывающая рекурсивные соотношения между ними в дифференциальной форме, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial \xi} &= \varepsilon u_1 - \{72u_1^2 + 2u_2^2 + 2u_5^2 + 2u_7^2\}K_4, \\ \frac{\partial u_2}{\partial \xi} &= \varepsilon u_2 - \{16u_2^2 + u_6^2 + 48u_1u_2 + 8u_5u_7\}K_4, \\ \frac{\partial u_3}{\partial \xi} &= \varepsilon u_3 - \{72u_3^2 + 2u_4^2 + 2u_5^2 + 2u_7^2\}K_4, \\ \frac{\partial u_4}{\partial \xi} &= \varepsilon u_4 - \{16u_4^2 + u_6^2 + 48u_3u_4 + 8u_5u_7\}K_4, \\ \frac{\partial u_5}{\partial \xi} &= \varepsilon u_5 - \{16u_5^2 + u_6^2 + 24(u_1 + u_3)u_5 + \\ &\quad + 4(u_2 + u_4)u_7\}K_4, \\ \frac{\partial u_6}{\partial \xi} &= \varepsilon u_6 - \{8(u_2 + u_4)u_6 + 16(u_5 + u_7)u_6\}K_4, \\ \frac{\partial u_7}{\partial \xi} &= \varepsilon u_7 - \{16u_7^2 + u_6^2 + 4(u_2 + u_4)u_5 + \\ &\quad + 24(u_1 + u_3)u_7\}K_4, \end{aligned} \tag{13}$$

где $\xi = \ln b$, b — параметр, описывающий изменение пространственного масштаба, $K_4 = 1/8\pi^2$, а $\varepsilon = 4 - d \ll 1$ — параметр малости. Исходя из этой системы уравнений и вводя обозначения $x_i = u_i K_4 / \varepsilon$, найдем уравнения, определяющие неподвижные точки ренормгруппового преобразования,

$$\begin{aligned} x_1 &= 72x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_5^2 + 2x_7^2, \\ x_2 &= 16x_2^2 + x_6^2 + 48x_1x_2 + 8x_5x_7, \\ x_3 &= 72x_3^2 + 2x_4^2 + 2x_5^2 + 2x_7^2, \\ x_4 &= 16x_4^2 + x_6^2 + 48x_3x_4 + 8x_5x_7, \\ x_5 &= 16x_5^2 + x_6^2 + 24(x_1 + x_3)x_5 + 4(x_2 + x_4)x_7, \\ x_6 &= 8(x_2 + x_4)x_6 + 16(x_5 + x_7)x_6, \\ x_7 &= 16x_7^2 + x_6^2 + 4(x_2 + x_4)x_5 + 24(x_1 + x_3)x_7. \end{aligned} \tag{14}$$

Уравнения (14) в том случае, когда все параметры отличны от нуля, имеют два решения, определяющие неподвижные точки,

$$\begin{aligned} x_1^* &= \frac{1}{160}, & x_2^* &= \frac{1}{80}, & x_3^* &= \frac{1}{160}, & x_4^* &= \frac{1}{80}, \\ x_5^* &= \frac{1}{80}, & x_6^* &= \frac{1}{20}, & x_7^* &= \frac{3}{80}, \\ x_1^* &= \frac{1}{160}, & x_2^* &= \frac{1}{80}, & x_3^* &= \frac{1}{160}, & x_4^* &= \frac{1}{80}, \\ x_5^* &= \frac{3}{80}, & x_6^* &= \frac{1}{20}, & x_7^* &= \frac{1}{80}. \end{aligned} \tag{15}$$

В третьей неподвижной точке,

$$\begin{aligned} x_1^* &= \frac{1}{96}, & x_2^* &= \frac{1}{48}, & x_3^* &= \frac{1}{96}, & x_4^* &= \frac{1}{48}, \\ x_5^* &= \frac{1}{48}, & x_6^* &= 0, & x_7^* &= \frac{1}{48}, \end{aligned} \tag{16}$$

параметр взаимодействия u_6 обращается в нуль. Имеются две неподвижные точки, в которых равны нулю два параметра u_6 и u_7 , описывающие взаимодействие между параметрами порядка двух переходов,

$$\begin{aligned} x_1^* &= \frac{1}{144}, & x_2^* &= 0, & x_3^* &= \frac{1}{144}, & x_4^* &= 0, \\ x_5^* &= \frac{1}{24}, & x_6^* &= 0, & x_7^* &= 0, \\ x_1^* &= \frac{1}{80}, & x_2^* &= 0, & x_3^* &= \frac{1}{80}, & x_4^* &= 0, \\ x_5^* &= \frac{1}{40}, & x_6^* &= 0, & x_7^* &= 0, \end{aligned} \tag{17}$$

а также еще 15 неподвижных точек, где равны нулю параметры u_5, u_6, u_7 .

Проверим устойчивость приведенных выше точек по первому приближению [18, 19]. Рассмотрим сначала устойчивость первой точки. Положим $u_i = u_i^* + \Delta u_i$ ($i = 1, \dots, 7$), где значения u_i определяются для первой неподвижной точки. Подставляя эти значения в систему дифференциальных уравнений (13), получим систему уравнений для величин Δu_i :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta u_i}{\partial \xi} &= \sum_{i,j} A_{ij}(u_1^*, \dots, u_7^*) \Delta u_j + R_i, \\ A_{ij} &= \left(\frac{\partial F_i(u_1, \dots, u_7)}{\partial u_j} \right)_{u_i=u_i^*}, \end{aligned} \tag{18}$$

где функции $F_i(u_1, \dots, u_7)$ — правые части дифференциальных уравнений, задающих рекурсивные соотношения между константами u_i , R_i — слагаемые более высокой степени по величинам Δu_i . Определим теперь собственные значения матрицы A для первой критической точки. Они равны $\{-\varepsilon, 2\varepsilon/5, 3\varepsilon/5, 2\varepsilon/5, -\varepsilon/5, \varepsilon/5, 0\}$. Для второй точки собственные значения матрицы A , найденные по той же процедуре, имеют значения $\{-1.018\varepsilon, 0.600\varepsilon, 0.587\varepsilon, 0.400\varepsilon, 0.213\varepsilon, -0.182\varepsilon, 6.781 \cdot 10^{-17}\varepsilon\}$. Таким образом, первые две неподвижные точки являются неустойчивыми точками ренормгруппового преобразования. При этом первая из них имеет критическую поверхность $\{u_1, u_5\}$. Все траектории, принадлежащие этой поверхности, приводят в неподвижную точку, а следовательно, на этих траекториях реализуются переходы второго рода. Исходя из вида критической поверхности, можно сделать заключение о том, что первый фазовый переход оказывается фазовым переходом второго рода, если траектория, соответствующая этому переходу, принадлежит указанной поверхности, тогда как второй переход будет в этом случае переходом первого рода.

В общем случае оба перехода оказываются переходами первого рода. Отметим также, что для первой критической точки параметр u_6 является существенным параметром, тогда как u_7 — промежуточным параметром. Для второй неподвижной точки критической поверхностью является многообразие $\{u_1, u_6\}$, поскольку все траектории, лежащие на этом многообразии, приводят в неподвижную точку. Это снова позволяет утверждать, что первый фазовый переход будет второго рода для траекторий на этой поверхности, тогда как второй переход должен быть первого рода.

В точке 3 собственные значения матрицы A равны $\{-\varepsilon, -3\varepsilon/2, 0, 0, 0, -\varepsilon, 0\}$. Эта критическая точка является устойчивой. Для данной точки параметры u_5, u_7 , описывающие взаимодействие параметров порядка двух переходов, оказываются промежуточными и не влияют на сами переходы. Оба перехода должны быть переходами второго рода. Точка 4 также оказывается устойчивой точкой, поскольку собственные значения матрицы A есть $\{0, -\varepsilon/3, 0, 0, -\varepsilon, -2\varepsilon/3, -2\varepsilon/3\}$. Все три параметра, описывающие взаимодействие параметров порядка переходов, оказываются несущественными. Точка 5 есть асимптотически устойчивая точка ренормгруппового преобразования. Собственные значения матрицы A в этой точке равны $\{-4\varepsilon/5, -3\varepsilon/5, -\varepsilon, -2\varepsilon/5, -\varepsilon/5, -2\varepsilon/5, -4\varepsilon/5\}$.

Из рассмотрения исследуемых переходов в рамках теории Ландау установлено, что электрическая поляризация может возникать в системе, только если параметр u_6 отличен от нуля. Таким образом, для нас представляют интерес только две первые неподвижные точки. Только в окрестности этих неподвижных точек в оксиде BiMn_2O_5 появляется поляризация. Исходя из предыдущего анализа становится ясно, что в системе реализуется именно первая неустойчивая неподвижная точка, в которой указанный параметр оказывается существенным.

6. ВЫВОДЫ

Анализ фазовых переходов из парамагнитного состояния в соизмеримую антиферромагнитную структуру в двух соединениях PrMn_2O_5 и BiMn_2O_5 , входящих в класс оксидов RMn_2O_5 , где R — редкоземельный элемент, Bi или Y , проведенный в работе [9] и в этой статье, показал, что появление ниже точки магнитного перехода электрической поляризации существенным образом зависит от того, по какому неприводимому представлению группы про-

странственной симметрии он осуществляется. Магнитный порядок этих соединений ниже температуры магнитного упорядочения, как установлено, характеризуется волновыми векторами, которым соответствуют одинаковые НП пространственной группы. Этим представлений два. Одно из них, характеризующее магнитный порядок в PrMn_2O_5 , вследствие правил преобразования компонент параметра порядка под действием элементов группы не допускает инвариантов в эффективном гамильтониане, содержащих поляризацию, в то время как в соединении BiMn_2O_5 такие инварианты вполне допустимы. Обращает на себя внимание тот факт, что в оксиде PrMn_2O_5 в точке фазового перехода флуктуации приводят к симметрии системы выше, чем симметрия исходного гамильтониана. Поэтому можно утверждать, что в случае, когда флуктуации повышают симметрию системы в точке перехода, поляризация не возникает. Более наглядно это утверждение проявляется в соединении BiMn_2O_5 , где в неподвижной точке 3, например, симметрия повышается до группы SO_4 и поляризация в системе отсутствует.

Экспериментально установлено, что в соединении BiMn_2O_5 упорядочение ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} происходит в результате двух близких по температуре фазовых переходов. Реализация этих переходов может происходить большим числом способов. Однако электрическая поляризация возникает только в той ситуации, когда фазовые переходы реализуются вблизи двух критических точек, содержащих наибольшее число параметров взаимодействия. По нашему мнению, эти переходы реализуются вблизи точки, в которой u_6 является существенным параметром. При этом спиновые флуктуации вблизи указанной точки приводят к тому, что по крайней мере второй из этих переходов становится переходом первого рода.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке УрО РАН (проект № 15-8-2-10).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, УФН **182**, 593 (2012).
2. N. Hur, S. Park, P. A. Sharma et al. , Nature **429**, 392 (2004).
3. P. G. Radaelli and L. C. Chapon, J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 434213 (2008).

4. V. Noda, H. Kimura, M. Fukunaga et al. , J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 434206 (2008).
5. В. В. Меньшенин, ЖЭТФ **135**, 265 (2009).
6. A. Munoz, J. A. Alonso, M. J. Martinez-Lope et al., J. Phys.: Condens. Matter. **24**, 076003 (2012).
7. A. Munoz, J. A. Alonso, and M. T. Casais, Phys. Rev. B **65**, 144423 (2002).
8. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
9. В. В. Меньшенин, ЖЭТФ **147**, 1174 (2015).
10. Ю. А. Изюмов, В. Е. Найш, Р. П. Озеров, *Нейтронография магнетиков*, Атомиздат, Москва (1981).
11. Г. А. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972).
12. М. А. Наймарк, *Теория представлений групп*, Наука, Москва (1976).
13. В. В. Меньшенин, ФТТ **54**, 1891 (2012).
14. A. B. Sushkov, M. Mostovoy, R. V. Aguilar et al., J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 343210 (2008).
15. К. Вильсон, Дж. Когут, *Ренормализационная группа и ϵ -разложение*, Мир, Москва (1975).
16. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
17. А. З. Поташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1980).
18. Л. С. Понтрягин, *Обыкновенные дифференциальные уравнения*, Наука, Москва (1979).
19. В. В. Меньшенин, ЖЭТФ **143**, 1136 (2013).