КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2011, том 56, № 3, с. 509–510

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

УДК 538.91+536.71

БАЗИС ИНВАРИАНТОВ ДЛЯ СЕГНЕТОМАГНЕТИКА

© 2011 г. В. Б. Широков
Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону
E-mail: shirokov-vb@rambler.ru

Поступила в редакцию 13.07.2010 г.

Приведен метод построения базиса инвариантов, в котором выделен наряду с независимым линейный базис. Это разбиение позволяет однозначно найти все инварианты в заданной степени. Построен базис инвариантов и найден линейный базис для двух трехкомпонентных параметров порядка сегнетомагнетика – поляризации и магнитного момента.

Современные феноменологические модели фазовых переходов (теория Ландау) в кристаллах для реологического описания физического эксперимента используют сложные потенциалы все более высоких степеней по многомерному параметру порядка [1, 2]. Существование конечного базиса инвариантов для случая конечных групп, которыми описывается симметрия параметров порядка твердого тела, в большинстве случаев позволяет сформулировать достаточно простые правила построения всех инвариантов произвольно выбранной степени. Эти правила легко алгоритмизируются средствами современных математических пакетов.

Построение базиса инвариантов проводится последовательным нахождением инвариантов в каждой степени и исключением из их числа тех, которые можно представить через произведения инвариантов уже найденных [3, 4]. Эта процедура должна проводиться с одновременным приведением к дробно-рациональному виду перечисляющей функции [5], разложение которой дает ряд Пуанкаре [6] для выбранной группы (представления). Ряд Пуанкаре определяется как формальный степенной ряд по переменной z, в котором коэффициент a_k при z^k определяет число инвариантов в степени k. Знаменатель полученной таким образом дроби дает число и степени алгебраически *независимого* базиса, числитель перечисляет по степеням число инвариантов *линейного* базиса. Для конечных групп ряд Пуанкаре дается разложением в ряд функции $P(z)$, вычисленной по формуле Молина [7].

$$P(z) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\frac{1}{\det(I - zT(g))} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k z^k. \qquad (1)$$

Здесь $|G|$ – порядок группы, I – единичная матрица, $T(g)$ – матрица представления группы для элемента g. Выражение (1) последовательно по степеням с одновременным вычислением базиса инвариантов приводится к виду

$$P(z) = \frac{1 + \sum a_m z^m}{(1 - z^{d_1})(1 - z^{d_2}) \cdot \cdot \cdot (1 - z^{d_s})}. \qquad (2)$$

В (2) все $a_m > 0$ дают число инвариантов линейного базиса $U_{m,i}$ в степени m ($i = 1, 2, ..., a_m$), а каждое число d_i определяет степень инварианта независимого базиса J_k. Последовательные вычисления по степеням с одновременным приведением (1) к виду (2) позволяют найти базис и выделить независимые инварианты J_k и зависимые инварианты, из произведений которых можно сформировать линейный базис $U_{m,i}$. Формула (2) характеризует вид разложения в ряд произвольной функции $f(\eta)$, инвариантной относительно заданной группы, в следующем виде

$$f(\eta) = \Phi(J_k) + \sum_{m,i} U_{m,i}\Psi_{m,i}(J_k). \qquad (3)$$

Функции $\Phi(J_k)$ и $\Psi_{m,i}(J_k)$ в (3) являются полиномами по инвариантам J_k независимого базиса. Для групп, порожденных отражениями, в числителе (2) стоит единица [5]. В этом случае между инвариантами базиса нет никаких соотношений (сизигий), так что базис является функционально независимым. Тогда всевозможные произведения инвариантов базиса, которые дают фиксированную степень, полностью определяют все линейно независимые инварианты в этой степени. В общем случае правило образования произведений инвариантов из выбранного базиса, определяющих все линейно независимые инварианты некоторой степени, дается формулой (3).

Феноменологический потенциал, описывающий свойства сегнетомагнетика, содержит два трехкомпонентных параметра порядка $\mathbf{m} \oplus \mathbf{p}$, $\mathbf{m}$ – магнитный момент, $\mathbf{p}$ – поляризация. Трансформационные свойства этих параметров порядка в группе $m3m \otimes R$, где R – инверсия времени, задаются следующими матрицами (генераторами группы):

$$
\begin{array}{ccccccc}
 & C_2^x & C_2^y & C_3 & C_2^{xy} & I & R \\
\mathbf{p}: & \begin{vmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} & -1 & \\ -1 & & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{vmatrix} \\
\mathbf{m}: & \begin{vmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} & -1 & \\ -1 & & \\ & & -1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{vmatrix}
\end{array} \qquad (4)
$$

Точно такие же матрицы генераторов будут и для группы симметрии $F_{1u} \oplus R_{25}$ параметра порядка твердых растворов $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ [2]. В этом случае матрице, соответствующей инверсии времени, будет соответствовать матрица трансляций a_1, a_2, a_3 того же вида, т.е. инварианты для сегнетомагнетика и твердого раствора, а значит, и соответствующие потенциалы можно получить из инвариантов для $\mathbf{m} \oplus \mathbf{p}$ формальной заменой магнитного момента $\mathbf{m}$ на ротационный параметра порядка $\boldsymbol{\varphi}$.

Формула (1) для функции Молина и ряда Пуанкаре для группы, определяемой генераторами (4), дает следующее перечисление для инвариантов

$$
\begin{gathered}
P(z) = \frac{1 + 2z^4 + 4z^6 + 5z^8 + 4z^{10} + 5z^{12} + 2z^{14} + z^{16}}{(1 - z^2)^2(1 - z^4)^2(1 - z^6)^2} = \\
= 1 + 2z^2 + 7z^4 + 18z^6 + 41z^8 + 84z^{10} + 163z^{12} + \\
+ 288z^{14} + 488z^{16} + \cdots .
\end{gathered} \qquad (5)
$$

Вычисления по описанной выше схеме дают базис, состоящий из 14 инвариантов. Расчет с учетом функции Молина позволяет провести следующее разбиение базиса:

$$
\begin{gathered}
J_1 = m_1^2 + m_2^2 + m_3^2, \\
J_2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2, \\
J_3 = m_1^2 m_2^2 + m_1^2 m_3^2 + m_2^2 m_3^2, \\
J_4 = p_1^2 p_2^2 + p_1^2 p_3^2 + p_2^2 p_3^2, \\
I_5 = p_1^2 m_2^2 + p_2^2 m_1^2 + p_1^2 m_3^2 + p_3^2 m_1^2 + p_2^2 m_3^2 + p_3^2 m_2^2 \\
I_6 = p_1 p_2 m_1 m_2 + p_1 p_3 m_1 m_3 + p_2 p_3 m_2 m_3 \\
J_7 = m_1^2 m_2^2 m_3^2, \\
I_8 = p_1^2 m_2^2 m_3^2 + p_2^2 m_3^2 m_1^2 + p_3^2 m_1^2 m_2^2 \\
I_9 = m_1 m_2 m_3 (p_1 p_2 m_3 + p_2 p_1 m_3 + p_3 p_1 m_2) \\
I_{10} = p_1^2 p_2^2 m_3^2 + p_2^2 p_3^2 m_1^2 + p_1^2 p_3^2 m_2^2 \\
I_{11} = p_1 p_2 p_3 (p_1 m_2 m_3 + p_2 m_1 m_3 + p_3 m_1 m_2) \\
J_{12} = p_1^2 p_2^2 p_3^2, \\
I_{13} = m_1 m_2 m_3 \Big[(m_1^2 + m_2^2) m_3 p_1 p_2 + \\
+ (m_2^2 + m_3^2) m_1 p_2 p_3 + (m_1^2 + m_3^2) m_2 p_1 p_3 \Big] \\
I_{14} = p_1 p_2 p_3 (m_1 m_2 p_3^3 + m_1 m_3 p_2^3 + m_2 m_3 p_1^3).
\end{gathered} \qquad (6)
$$

Здесь J_k – инварианты алгебраически независимого базиса, I_m – инварианты зависимого базиса, конечное число произведений которых составляет линейный базис $U_{m,i}$. Вычисление линейного базиса в соответствии с (5) дает следующий конечный список произведений инвариантов I_m, составляющих базис $U_{m,i}$:

$$
\begin{aligned}
&(4)\ 2\,\{I_5, I_6\} \\
&(6)\ 4\,\{I_8, I_9, I_{10}, I_{11}\} \\
&(8)\ 5\,\{I_5^2, I_5 I_6,\ I_6^2, I_{13}, I_{14}\} \\
&(10)\ 4\,\{I_5 I_9, I_5 I_{11}, I_6 I_9, I_6 I_{11}\}. \\
&(12)\ 5\,\{I_8 I_9, I_8 I_{10}, I_8 I_{11}, I_9 I_{11}, I_{10} I_{11}\} \\
&(14)\ 2\,\{I_6^2 I_9, I_6^2 I_{11}\} \\
&(16)\ 1\,\{I_6 I_8 I_{10}\}.
\end{aligned} \qquad (7)
$$

Произведения инвариантов зависимого базиса (7) определяют функции $U_{m,i}$ линейного базиса (3), количественно по степеням соответствующие числителю в (5). Цифра в круглых скобках в (7) означает степень инвариантов, цифра перед фигурной скобкой – число инвариантов линейного базиса (число произведений) в данной степени. Как видно из (7), для решения задачи разложения (3) для сегнетомагнетика требуется выполнить вычисления до 16 степени включительно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Li Y.L., Cross L.E., Chen L.Q.* // J. Appl. Phys. 2005. V. 98. P. 064101.
2. *Shirokov V.B., Yuzyuk Yu.I., Dkhil B., Lemanov V.V.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 144118.
3. *Широков В.Б.* // Физика металлов и металловедение. 1982. Т. 54. С. 880.
4. *Вейль Г.* Классические группы, их инварианты и представления. М.: Изд-во иностр. лит., 1947. 400 с.
5. *Спрингер Т.А.* Теория инвариантов. М.: Мир, 1981, 192 с.
6. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли. М.: Мир, 1972. 331 с.
7. *Jaric M.V., Birman J.L.* // J. Math. Phys. 1977. V. 18. P. 1456.