ЖЭТФ, 2009, том 135, вып. 3, стр. 536–543

О ТЕНЗОРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

А. М. Фарутин [*,**]

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

Поступила в редакцию 16 октября 2008 г.

В рамках теории Ландау получены фазовые диаграммы для переходов второго рода с параметром порядка в виде симметричного бесследового тензора ранга не больше шести, преобразующегося по одномерному представлению кристаллической группы. Для ранга, равного трем, исследован также случай двумерного представления.

PACS: 75.10.-b

1. ВВЕДЕНИЕ

Спиновые нематики [1] и тензорные магнетики [2] характеризуются тензорным параметром порядка $S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}$: тензором ранга N, полностью симметричным и обращающимся в нуль при сворачивании по паре индексов. Фазовая диаграмма для $N = 2$ была построена в работе [3]. Задача о фазовом переходе с тензорным параметром порядка возникает и в других областях физики, в частности, фазовая диаграмма для $N = 3$ была построена в работе [4] в применении к жидким кристаллам.

Произвольный симметричный бесследовый тензор ранга N задается $2N + 1$ независимыми параметрами. В общем случае лишь три из них можно обратить в нуль выбором системы координат в спиновом пространстве. Такое большое число независимых переменных приводит к довольно сложным выражениям для сверток, так что их вычисление через компоненты в декартовых координатах становится малоэффективным с ростом N.

В работе представлены фазовые диаграммы для $3 < N \leq 6$, изложен способ простого вычисления сверток. В некоторых случаях решения найдены аналитически. Предложенные методы допускают обобщения на случай бо́льших N.

Обменная инвариантность требует, чтобы разложение энергии по степеням параметра порядка было линейной комбинацией его сверток. Разложение до четвертой степени имеет вид

$$E = \frac{1}{2}\tau S^2_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N} + \frac{1}{4}\sum_i \beta_i Q_i(S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}), \tag{1}$$

где $\tau \leq 0$, а $Q_i(S)$ — всевозможные линейно независимые свертки четырех тензоров S. Как показано в Приложении A, всего таких сверток не более $[N/3] + 1$, компьютерные вычисления показывают, что для $N \leq 6$ это точная оценка. В случае четного N необходимо, чтобы параметр порядка преобразовывался по неединичному представлению кристаллической группы, в противном случае в разложении (1) возникнут свертки третьей степени по S.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ СВЕРТОК

Для вычисления сверток разложим тензор по базису $2N + 1$ сферических функций с моментом N и различными проекциями момента на выбранную ось. Обозначим $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ базис в спиновом пространстве и введем комплексные векторы

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{i}{2}(\mathbf{b} + i\mathbf{c}), \quad \boldsymbol{\nu} = \frac{i}{2}(\mathbf{b} - i\mathbf{c}).$$

Определим k-й элемент базиса симметричных бесследовых тензоров ранга N S^k_N с индексами α_1, $\alpha_2, \ldots, \alpha_N$ по рекуррентной формуле

$$S^k_{N,\alpha_1\ldots\alpha_N} = a_{\alpha_N} S^k_{N-1,\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}} + \\ + \mu_{\alpha_N} S^{k-1}_{N-1,\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}} + \nu_{\alpha_N} S^{k+1}_{N-1,\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}}, \tag{2}$$

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

[**] Laboratoire de Spectrométrie Physique, Université Joseph Fourier, CNRS, 38402 Saint Martin d'Hères, France

$S_0^0 = 1$, $S_N^k = 0$ при $|k| > N$. С помощью формулы (2) и индукции по N легко убедиться, что все тензоры S_N^k симметричны и обращаются в нуль при сворачивании по любой паре индексов. Хотя явный вид тензоров S_N^k, $|k| \le N$, далее в работе не используется, выпишем их для $N = 1, 2, 3$:

$$S^{-1}_{1,\alpha_1} = \nu_{\alpha_1}, \quad S^0_{1,\alpha_1} = a_{\alpha_1}, \quad S^1_{1,\alpha_1} = \mu_{\alpha_1};$$

$$S^{-2}_{2,\alpha_1\alpha_2} = \nu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}, \quad S^{-1}_{2,\alpha_1\alpha_2} = \nu_{\alpha_1}a_{\alpha_2} + a_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2},$$

$$S^0_{2,\alpha_1\alpha_2} = a_{\alpha_1}a_{\alpha_2} + \nu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2} + \mu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2},$$

$$S^1_{2,\alpha_1\alpha_2} = \mu_{\alpha_1}a_{\alpha_2} + a_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}, \quad S^2_{2,\alpha_1\alpha_2} = \mu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2};$$

$$S^{-3}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = \nu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3},$$

$$S^{-2}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = a_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}a_{\alpha_3},$$

$$S^{-1}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = a_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + a_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + \\ + \nu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3},$$

$$S^{0}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = a_{\alpha_1}a_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + a_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + a_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \\ + \nu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}a_{\alpha_3},$$

$$S^{1}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = a_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + a_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}a_{\alpha_3} + \\ + \mu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\nu_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}\nu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + \nu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3},$$

$$S^{2}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = a_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}a_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3} + \mu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}a_{\alpha_3},$$

$$S^{3}_{3,\alpha_1\alpha_2\alpha_3} = \mu_{\alpha_1}\mu_{\alpha_2}\mu_{\alpha_3}.$$

Поскольку полученные тензоры S_N^k, $|k| \le N$, линейно независимы и их $2N+1$, они образуют базис в пространстве симметричных бесследовых тензоров ранга N. Поэтому для любого элемента этого пространства можно написать разложение

$$S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N} = \sum_{k=-N}^{N} A_k S_N^k, \tag{3}$$

где A_k — некоторые комплексные числа. С помощью индукции по N легко доказать, что

$$(S_N^k)^* = (-1)^k S_N^{-k},$$

так что на коэффициенты разложения (3) для действительного тензора S накладывается дополнительное условие $A_k^* = (-1)^k A_{-k}$.

Используя равенство (2), получаем, что свертка $S_N^k S_M^l$ по паре индексов будет равна

$$S^k_{N-1}S^l_{M-1} - \frac{1}{2}\left(S^{k+1}_{N-1}S^{l-1}_{M-1} + S^{k-1}_{N-1}S^{l+1}_{M-1}\right).$$

С помощью этого соотношения можно выразить свертки тензора через коэффициенты A_k. Свертка квадрата тензора записывается как

$$S^2_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N} = \frac{1}{2^N}\sum_{k=-N}^{N}(-1)^k C_{2N}^{N+k} A_k A_{-k}.$$

Свертка четвертой степени по S, в которой первый тензор сворачивается со вторым по i_1 индексам и с третьим по i_2 индексам, $i_1 + i_2 = N$, имеет вид

$$\frac{1}{4^N}\sum_{k=-i_1}^{i_1}\sum_{l=-i_1}^{i_1}\sum_{m=-i_2}^{i_2}\sum_{n=-i_2}^{i_2}(-1)^{k+l+m+n}C_{2i_1}^{i_1+k}\times \\ \times C_{2i_1}^{i_1+l}C_{2i_2}^{i_2+m}C_{2i_2}^{i_1+n}A_{k+n}A_{l-n}A_{-k+m}A_{-l-m}.$$

Методы получения выражений для произвольных сверток приведены в Приложении А.

С помощью этих выражений легко минимизировать энергию при численных расчетах, но в некоторых случаях возможно простое аналитическое решение. Из неравенства

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\beta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma} - t\delta_{\beta\gamma}\right)^2 \ge 0$$

получаем, что

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\beta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma}\right)^2 \ge \frac{1}{3}\left(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\right)^2, \tag{4}$$

причем равенство верно только тогда, когда

$$S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\beta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma} \propto \delta_{\beta\gamma}. \tag{5}$$

Аналогично из неравенства

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\beta\eta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\gamma\zeta} - tD_{\beta\gamma\eta\zeta}\right)^2 \ge 0,$$

где

$$D_{\beta\gamma\eta\zeta} = \frac{1}{2}\left(\delta_{\beta\gamma}\delta_{\eta\zeta} + \delta_{\beta\zeta}\delta_{\gamma\eta}\right) - \frac{1}{3}\delta_{\beta\eta}\delta_{\gamma\zeta}, \tag{6}$$

получается, что

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\beta\eta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\gamma\zeta}\right)^2 \ge \frac{1}{5}\left(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\right)^2, \tag{7}$$

причем равенство достигается, когда $S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\beta\eta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\gamma\zeta}$ пропорционально тензору (6), имеющему сферическую симметрию. В действительности, эти неравенства верны для любого тензора, необязательно симметричного и бесследового. Также можно доказать (см. Приложение Б), что

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\beta}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma}\right)^2 \le \frac{1}{2}\left(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\right)^2. \tag{8}$$

Тут равенство достигается в случае, когда выбором базиса в спиновом пространстве тензор S можно свести к виду

$$AS_N^N + (-1)^N A^* S_N^{-N}. \tag{9}$$

Для любого симметричного бесследового тензора можно выбрать систему координат, в которой $A_1 = A_{-1} = 0$ в разложении (3). Действительно, выберем ось координат $\mathbf{a}$ так, чтобы значение функции

$$S_{\alpha_1\ldots\alpha_N} a_{\alpha_1} \ldots a_{\alpha_N} \tag{10}$$

было минимально. Минимизируя выражение (10) при условии $\mathbf{a}^2 = 1$, имеем

$$S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\alpha_N} a_{\alpha_1} \ldots a_{\alpha_{N-1}} = t a_{\alpha_N}.$$

Подставив для S разложение (3), получим, что $A_1 = A_{-1} = 0$. Заметим, что при повороте вокруг вектора $\mathbf{a}$ на угол φ коэффициент A_k умножается на $e^{ik\varphi}$. В некоторых случаях это позволяет легко определить симметрию тензора.

3. СЛУЧАЙ $N = 3, 4, 5$

Используя неравенства (8) и (4), легко разобраться с тензорами ранга 3, 4, 5. Действительно, в разложении (1) в этом случае есть два линейно независимых инварианта четвертой степени, при этом удобно взять следующие:

$$\frac{\beta_1}{4}\left(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\right)^2 + \frac{\beta_2}{4}\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\beta} S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma}\right)^2. \tag{11}$$

При $\beta_2 < 0$ применяется неравенство (8), таким образом получаем решение вида (9) с

$$AA^* = -\frac{2^N \tau}{2\beta_1 + \beta_2}. \tag{12}$$

Спиновая симметрия [5] таких решений D^s_{Nh}. Аргумент A остается неопределенным из-за инвариантности энергии относительно вращения спинового пространства вокруг вектора $\mathbf{a}$. Уравнение (12) не имеет решений при $2\beta_1 + \beta_2 < 0$, в этом случае члены четвертой степени в разложении (1) не являются положительно определенными, что соответствует фазовому переходу первого рода, так что эту область параметров необходимо исключить из рассмотрения. Аналогичные утверждения верны и для остальных решений. Заметим, что β_1 влияет лишь на модуль решения, но не на его вид, поэтому на рисунках с фазовыми диаграммами β_1 не отображается, но предполагается достаточно большим для того, чтобы члены четвертой степени были положительно определены.

При $\beta_2 > 0$ применяется неравенство (4), решению соответствуют тензоры, для которых верно равенство (5). Для $N = 3$ выбором системы координат решение сводится к виду [4]

$$S = AS_3^2 + A^* S_3^{-2},$$

$$AA^* = \frac{2\tau}{3\beta_1 + \beta_2}.$$

В этом случае спиновая симметрия T^s_d. Для $N = 4$ выбором осей в спиновом пространстве решение сводится к виду

$$S = AS_4^4 + A^* S_4^{-4} + BS_4^0,$$

$$AA^* = -\frac{10\tau}{3\beta_1 + \beta_2}, \quad B = B^* = \sqrt{-\frac{2\tau}{15\beta_1 + 5\beta_2}}.$$

Спиновая симметрия полученного состояния — O^s_h.

Для $N = 5$ равенство (5) выполняется для различных тензоров и для определения параметра порядка необходимо учесть следующие члены разложения. Имеется довольно большое число инвариантов шестой степени, но нам не удалось найти среди них больше трех линейно независимых. Значения инвариантов $(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N})^3$ и $S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}$ $(S_{\lambda_1\ldots\lambda_{N-1}\beta} S_{\lambda_1\ldots\lambda_{N-1}\gamma})^2$ фиксированы после минимизации старших членов разложения, поэтому для снятия вырождения нужно учесть лишь один инвариант, например $\sigma\mathbf{L}^2/6$, где

$$L_\lambda = S_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\beta\gamma} S_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\eta\zeta} S_{\beta\gamma\eta\zeta\lambda}. \tag{13}$$

Методом численной минимизации получено, что при $\sigma > 0$ решение записывается в виде $AS_5^0 + BS_5^4 + B^* S_5^{-4}$, после чего легко найти выражения для констант:

$$BB^* = 21A^2 = \frac{3\tau}{3\beta_1 + \beta_2}.$$

Для $\sigma < 0$ решение имеет вид $AS_5^0 + BS_5^5 - B^* S_5^{-5}$, а значения констант равны

$$A = \sqrt{\frac{8\tau}{105\beta_1 + 35\beta_2}},$$

$$BB^* = \sqrt{\frac{96\tau}{15\beta_1 + 5\beta_2}}.$$

Группы спиновой симметрии этих состояний, соответственно C^s_{4v} и C^s_{5v}, разрешают существование вектора, направленного вдоль оси симметрии. Действительно, для обоих решений вектор (13) не равен нулю. Поэтому переход в эту фазу сопровождается появлением несобственного ферро- или антиферромагнетизма [6], в зависимости от того, как преобразуется тензор S под действием группы кристаллической симметрии.

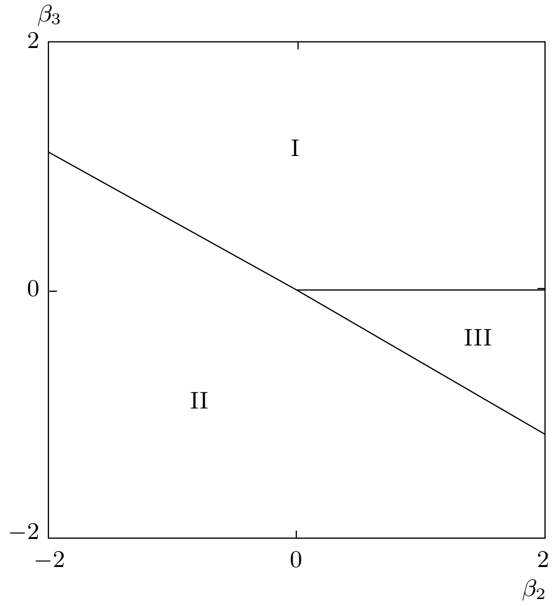

Рис. 1. Фазовая диаграмма для $N = 6$

4. СЛУЧАЙ $N = 6$

Для тензоров шестого ранга есть три линейно независимых инварианта четвертой степени. Кроме (11) возьмем в разложении (1)

$$Q_3(S) = \left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma}S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-2}\eta\zeta}\right)^2. \qquad (14)$$

Для $N = 6$ использовалась численная минимизация, но устойчивость некоторых фаз можно по-прежнему объяснить с помощью неравенств. Фазовая диаграмма изображена на рис. 1. В фазе I параметр порядка имеет группу симметрии икосаэдра Y_h^s. В области $\beta_2, \beta_3 > 0$, $\beta_1 + \beta_2/3 + \beta_3/5 \geq 0$ устойчивость этого решения следует из неравенств (4) и (7). Выбором осей в спиновом пространстве это решение можно свести к виду

$$S = A(S_6^0 + 7(S_6^5 - S_6^{-5})),$$

$$A = \sqrt{\frac{-16\tau}{525\beta_1 + 175\beta_2 + 105\beta_3}}.$$

Фазе II соответствует спиновая симметрия D_{6h}^s, решение имеет вид (9), где

$$AA^* = \frac{-2^N\tau}{2\beta_1 + \beta_2 + \beta_3}. \qquad (15)$$

Устойчивость данной фазы при $\beta_2, \beta_3 < 0$, $\beta_1 + \beta_2/2 + \beta_3/2 \geq 0$ подтверждается неравенством (8) и аналогичным неравенством $Q_3(S) \leq (S^2)^2/2$. Спиновая симметрия фазы III — O_h, параметр порядка определяется выражением $S = A(S_6^0 + 7(S_6^4 + S_6^{-4}))$, где

$$A = \sqrt{\frac{-44\tau}{5082\beta_1 + 1694\beta_2 + 1085\beta_3}}.$$

$S_{\alpha_1\ldots\alpha_6}S_{\alpha_1\ldots\alpha_4\beta_1\beta_2}$ имеет ту же симметрию, поэтому в этой фазе возникает несобственный тензор четвертого ранга с кубической симметрией, величина которого пропорциональна τ^2. Легко также найти границы между фазами: $\beta_3 = 0$, $5\beta_2 + 9\beta_3 = 0$, $121\beta_2 + 208\beta_3 = 0$.

5. СЛУЧАЙ $N = 3$, ДВУМЕРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Вернемся к случаю $N = 3$ для параметра порядка, преобразующегося по двумерному представлению E кристаллического класса C_{3v}. В работе [6] была рассмотрена лишь небольшая часть фазовой диаграммы, здесь опишем все фазы, имеющиеся на ней. Разложение для энергии имеет вид

$$\begin{aligned}E = \tau S_{\alpha\beta\gamma}S^*_{\alpha\beta\gamma} + \beta_1(S_{\alpha\beta\gamma}S^*_{\alpha\beta\gamma})^2 + \beta_2 S^2_{\alpha\beta\gamma}S^{*2}_{\lambda\mu\nu} + \\ + \beta_3 S_{\alpha\beta\gamma}S^*_{\alpha\beta\lambda}S_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda} + \beta_4 S^*_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda} + \\ + \beta_5 S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S^*_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda},\end{aligned}$$

где $S_{\alpha\beta\gamma} = S^{(1)}_{\alpha\beta\gamma} + iS^{(2)}_{\alpha\beta\gamma}$, $S^{(j)}_{\alpha\beta\gamma}$ — компоненты параметра порядка. Из равенства (22) для тензоров S, S^*, $S \pm S^*$ легко получить, что член $S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\lambda\mu}S^*_{\beta\lambda\nu}S^*_{\gamma\mu\nu}$ линейно зависим с остальными:

$$\begin{aligned}6S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\lambda\mu}S^*_{\beta\lambda\nu}S^*_{\gamma\mu\nu} = (S_{\alpha\beta\gamma}S^*_{\alpha\beta\gamma})^2 + \\ + 2S^2_{\alpha\beta\gamma}S^{*2}_{\lambda\mu\nu} - 2S_{\alpha\beta\gamma}S^*_{\alpha\beta\lambda}S_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda} - \\ - 2S^*_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda} - 2S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S^*_{\mu\nu\gamma}S^*_{\mu\nu\lambda}.\end{aligned}$$

Всего удалось обнаружить девять фаз (см. рис. 2). Из них четыре имеют высокую симметрию, не допускающую существования несобственного векторного магнетизма: в двух фазах, изображенных на рис. 2*а* один из тензоров $S^{(j)}_{\alpha\beta\gamma}$ обращается в нуль. В этом случае разложение энергии для второго тензора $S^{(j)}_{\alpha\beta\gamma}$ получается таким же, как и для тензора третьего ранга, преобразующегося по одномерному представлению. В результате, фаза VIII имеет симметрию D^s_{3h}, а фаза IX — T^s_d.

На рис. 2*б* показаны остальные семь фаз. В области I

$$S = \sqrt{\frac{-2\tau}{\beta_1 + \beta_4}}S_3^3.$$

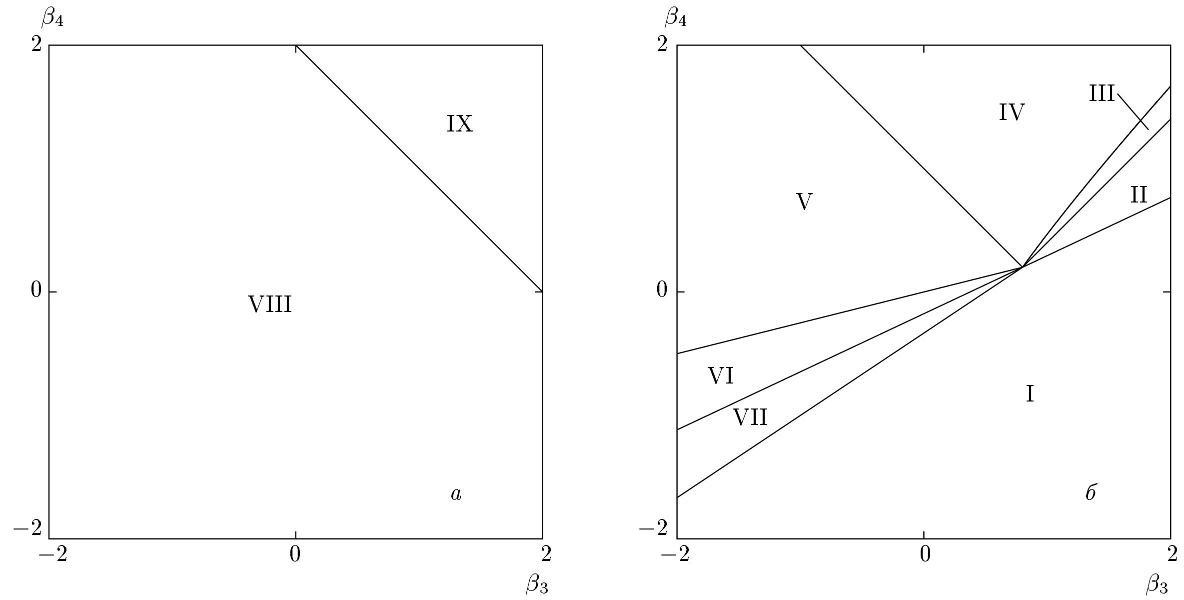

Рис. 2. Фазовые диаграммы для $N = 3$ в случае, когда параметр порядка преобразуется по двумерному представлению, $\beta_5 = -1$, $\beta_2 = -10$ (*а*), 1 (*б*)

Спиновая симметрия такого состояния C_{3h}^s. В области II

$$S = \sqrt{\frac{-6\tau}{9\beta_1 + \beta_3 + 5\beta_4}} S_3^2.$$

Спиновая симметрия фазы C_2^s. Область III подробно рассмотрена в работе [6], ее симметрия C_s^s. В области IV такая же спиновая симметрия, но параметр порядка задается другой формулой:

$$S = r\cos\phi(S_3^1 - 2S_3^3 + 3S_3^{-3}) + r\sin\phi(S_3^{-1} - 2S_3^{-3} + 3S_3^3),$$

где

$$r^2 = -\tau(70\beta_2 + 9\tilde{\beta} + 23\beta_5) \times$$
$$\times \left\{2[\beta_1\beta' + 9\beta_5^2 + 67\beta_2\tilde{\beta} + 26\tilde{\beta}\beta_5 + 27\beta_2\beta_5 + 9\tilde{\beta}^2]\right\}^{-1},$$

$$\sin 2\phi = \frac{30\beta_2 + 3\tilde{\beta} + 9\beta_5}{70\beta_2 + 9\tilde{\beta} + 23\beta_5},$$
$$\tilde{\beta} = \beta_3 + \beta_4, \quad \beta' = 200\beta_2 + 27\tilde{\beta} + 67\beta_5.$$

В области V спиновая группа E^s, из-за такой низкой симметрии нам не удалось найти аналитическое выражение для решения в этой области. В области VI две фазы имеют одинаковую энергию, в первой фазе

$$S = \eta S_3^2 + \zeta S_3^{-3}, \tag{16}$$

во второй

$$S = \eta' S_3^1 + \zeta' S_3^{-2}. \tag{17}$$

Модули констант определяются следующими выражениями:

$$\eta\eta^* = \frac{-2\tau\tilde{\beta}}{(\beta_1 + \beta_4)(-11\beta_3 + 14\beta_4 - 6\beta_5) - \tilde{\beta}^2},$$

$$\zeta\zeta^* = \frac{-4\tau(-5\beta_3 + 5\beta_4 - 3\beta_5)}{(\beta_1 + \beta_4)(-11\beta_3 + 14\beta_4 - 6\beta_5) - \tilde{\beta}^2},$$

$$\eta'\eta'^* = \zeta\zeta^*/9, \ \zeta'\zeta'^* = \eta\eta^* - \eta'\eta'^*,$$
$$\tilde{\beta} = 3\beta_4 - 2\beta_3 - \beta_5.$$

Различие этих решений проявляется в свертках шестой степени, кроме того для определения соотношения между аргументами параметров в решении (16) необходимо разложить энергию до тридцатой степени, а в решении (17) — до шестой. Действительно, пусть некоторый член разложения энергии является сверткой k штук S и l штук S^*, тогда из инвариантности энергии относительно кристаллических преобразований следует, что $k - l$ кратно трем, а из того, что ранг тензора нечетен, следует, что $k - l$ кратно двум. Для решения (17) члены шестой степени оказываются зависимыми от фаз η' и ζ'. Раскрыв скобки в произведении $S^k S^{*l}$ для решения (16), получим выражения вида

$$\eta^a \eta^{*b} \zeta^c \zeta^{*d} (S_3^2)^a (S_3^{-2})^b (S_3^3)^c (S_3^{-3})^d, \tag{18}$$

где $a + d = k$, $b + c = l$. Для того чтобы какая-либо свертка выражения (18) была не равна нулю, оно должно быть инвариантно относительно вращения спинового пространства вокруг вектора **a**, это значит, что $2(a-b)+3(c-d)=0$. Следовательно, есть целое число f такое, что $a-b=3f$, а также $c-d=-2f$. Отсюда получаем, что

$$k-l=a+d-b-c=5f.$$

Как было показано выше, число $k-l$ также должно быть кратно шести, т. е. $k-l$ делится на 30. Члены, в которых $k-l=0$, зависят лишь от модулей η и ζ, так как для них $a=b$ и $c=d$. Получаем, что $|k-l|\geq 30$, что возможно в членах тридцатой степени.

Симметрия обеих фаз E^s. В области VII остается лишь одна фаза (16), так как формулы для $\zeta'\zeta'^*$ дают отрицательные значения. В этой же области и в части области I у энергии есть еще один локальный минимум, определяющийся по формуле (17) с

$$\zeta'=0, \quad \eta'\eta'^*=\sqrt{\frac{-60\tau}{225\beta_1+76\beta_3+101\beta_4+36\beta_5}},$$

энергия которого больше энергии основного решения.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение мы представили фазовые диаграммы для теории Ландау фазовых переходов второго рода с параметром порядка в виде симметричного бесследового спинового тензора ранга не больше шести, преобразующегося по одномерному представлению кристаллической группы. Для тензора третьего ранга был рассмотрен и случай двумерного представления. Были получены решения, характеризующиеся следующими группами спиновой симметрии: T_d^s, O_h^s, Y_h^s, D_{nh}^s, C_{3h}^s, C_2^s, E^s, C_s^s, C_{4v}^s, C_{5v}^s.

Благодарю Е. Р. Подоляка за консультации по компьютерным вычислениям и В. И. Марченко за полезное обсуждение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №06-02-17281) и Фонда содействия отечественной науке.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Линейные соотношения для сверток

Для тензора S возьмем функцию

$$f(x)=\sum_k A_k x^{2k},$$

где A_k — коэффициенты в разложении (3) для S. Тензорному произведению тензоров $T_1,\ldots,T_l$, которым соответствуют функции $f_1(x),\ldots,f_l(x)$ сопоставим функцию $f_1(x_1)\ldots f_l(x_l)$. Пусть есть два тензора $S_{\alpha_1\ldots\alpha_N}$ и $T_{\beta_1\ldots\beta_M}$, которым соответствуют функции $f(x)$ и $g(y)$. Тогда, если в произведении

$$f(x)g(y)\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{y^2}+\frac{y^2}{x^2}\right)\right]=-f(x)g(y)\frac{(x-y)^2}{2xy}$$

оставить только члены, в которых x входит в степени по модулю не большей $2N-2$, а y в степени по модулю не большей $2M-2$, то получившаяся функция соответствует свертке $S_{\alpha_1\ldots\alpha_{N-1}\gamma}T_{\beta_1\ldots\beta_{M-1}\gamma}$. После N-кратного применения такого рассуждения получим, что $S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_N}$ равно свободному члену в выражении

$$f(x)f(y)\frac{(-1)^N(x-y)^{2N}}{(2xy)^N}.$$

Для вычисления сверток четвертой степени нужно рассматривать функции четырех переменных x_1, x_2, x_3, x_4. Свертка, где первый тензор сворачивается со вторым по k_1 индексам, с третьим — по k_2, с четвертым — по k_3, $(k_1+k_2+k_3=N)$ равна свободному члену функции

$$\frac{f(x_1)f(x_2)f(x_3)f(x_4)}{(4x_1x_2x_3x_4)^N}[(x_1-x_2)(x_3-x_4)]^{2k_1}\times$$
$$\times[(x_1-x_3)(x_4-x_2)]^{2k_2}[(x_1-x_4)(x_2-x_3)]^{2k_3}. \quad (19)$$

Легко обобщить такие формулы на случай сверток других степеней S. Раскрыв скобки, можно получить формулы для вычисления произвольных сверток тензора S.

Для выяснения линейных зависимостей между свертками введем следующие обозначения:

$$p_1=(x_1-x_2)(x_3-x_4),$$
$$p_2=(x_1-x_3)(x_4-x_2),$$
$$p_3=(x_1-x_4)(x_2-x_3).$$

Величины p_i оказываются связанными соотношением

$$p_1+p_2+p_3=0. \quad (20)$$

Поскольку значения для сверток не должны меняться при перестановках x_1, x_2, x_3, x_4, можно симметризовать выражения (19) по этим переменным.

Покажем, что среди всевозможных выражений вида

$$p_1^{2k_1}p_2^{2k_2}p_3^{2k_3}+p_1^{2k_2}p_2^{2k_3}p_3^{2k_1}+p_1^{2k_3}p_2^{2k_1}p_3^{2k_2}+$$
$$+p_1^{2k_1}p_2^{2k_3}p_3^{2k_2}+p_1^{2k_2}p_2^{2k_1}p_3^{2k_3}+p_1^{2k_3}p_2^{2k_2}p_3^{2k_1}, \quad (21)$$

где $k_1 + k_2 + k_3 = N$, а p_i удовлетворяют равенству (20), можно выбрать не более $[N/3]+1$ линейно независимых выражений. Действительно, симметрический многочлен (21) можно представить как многочлен от основных симметрических многочленов для трех переменных

$$s_1 = p_1 + p_2 + p_3, \quad s_2 = p_1p_2 + p_2p_3 + p_3p_1,$$

$$s_3 = p_1p_2p_3.$$

Поскольку $s_1 = 0$, остаются только переменные s_2 и s_3. Все такие многочлены можно разложить по базису с элементами в виде $s_2^k s_3^l$, где $2k + 3l = 2N$, а таких элементов как раз $[N/3] + 1$. Разложив все функции вида (21) по такому базису, можно получить линейные соотношения для сверток.

Например, для $N = 3$ имеем

$$\frac{1}{2}(S^2_{\alpha\beta\gamma})^2 = (S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda})^2 + S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\lambda\mu}S_{\beta\lambda\nu}S_{\gamma\mu\nu}, \quad (22)$$

для $N = 4$ —

$$(S_{\alpha\beta\gamma\delta}S_{\alpha\beta\lambda\mu})^2 = -\frac{3}{10}(S^2_{\alpha\beta\gamma\delta})^2 + \frac{8}{5}(S_{\alpha\beta\gamma\delta}S_{\alpha\beta\gamma\lambda})^2,$$

$$10S_{\alpha\beta\gamma\delta}S_{\alpha\beta\lambda\mu}S_{\nu\rho\gamma\lambda}S_{\nu\rho\delta\mu} = (S^2_{\alpha\beta\gamma\delta})^2 - 2(S_{\alpha\beta\gamma\delta}S_{\alpha\beta\gamma\lambda})^2.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Неравенства для сверток

Введем обозначение

$$T_{\beta\gamma} = S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-1}\beta}S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-1}\gamma},$$

требуется доказать, что

$$T^2_{\alpha\alpha} \geq 2T^2_{\alpha\beta}. \quad (23)$$

Выберем систему координат в спиновом пространстве, в которой тензор T имеет диагональный вид. Пусть t_1, t_2, t_3 — его собственные числа. Тогда

$$T_{\alpha\alpha} = t_1 + t_2 + t_3,$$

$$T^2_{\alpha\beta} = t_1^2 + t_2^2 + t_3^2,$$

а неравенство (23) запишется как

$$2(t_1^2 + t_2^2 + t_3^2) \leq (t_1 + t_2 + t_3)^2. \quad (24)$$

Собственные числа $t_i \geq 0$, так как для любого вектора $\mathbf{x}$

$$T_{\alpha\beta}x_\alpha x_\beta = (S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-1}\beta}x_\beta)^2 \geq 0.$$

Вспомогательное утверждение: пусть a_1, a_2, a_3 и b_1, b_2, b_3 — две тройки неотрицательных чисел, удовлетворяющих условию (24), тогда $a_1 + b_1$, $a_2 + b_2$, $a_3 + b_3$ — тоже тройка неотрицательных чисел, удовлетворяющих условию (24). Действительно,

$$\left(\sum_i (a_i + b_i)\right)^2 \geq 2\left(\sqrt{\sum_i a_i^2} + \sqrt{\sum_i b_i^2}\right)^2 =$$

$$= 2\left(\sum_i a_i^2 + \sum_i b_i^2\right) + 4\sqrt{\left(\sum_i a_i^2\right)\left(\sum_i b_i^2\right)} \geq$$

$$\geq 2\left(\sum_i a_i^2 + \sum_i b_i^2\right) + 4\sum_i a_ib_i = 2\sum_i (a_i + b_i)^2.$$

Таким образом, если $U_{\alpha\beta} = V_{\alpha\beta} + W_{\alpha\beta}$ — тензор, приведенный к собственным осям, а V и W — два тензора, необязательно диагональных в выбранной системе координат, но такие, что их диагональные элементы неотрицательны и удовлетворяют условию (24), то для U верно неравенство (23). По индукции можно распространить это утверждение на сумму произвольного числа тензоров.

Если зафиксировать индексы $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_{N-2}$, то $S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma} = A_{\beta\gamma}$ — симметричный бесследовый тензор второго ранга, для него верно равенство (проверяется приведением тензора к собственным осям)

$$(A_{\beta\gamma}A_{\gamma\lambda})^2 = \frac{1}{2}(A^2_{\beta\gamma})^2.$$

Отсюда следует, что диагональные элементы матрицы

$$\sum_\gamma A_{\beta\gamma}A_{\gamma\lambda} = \sum_\gamma S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma}S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\gamma\lambda}$$

(в этом равенстве не проводится суммирование по повторяющимся индексам) удовлетворяют условию (24). Поскольку они неотрицательны, получаем, что $T_{\gamma\lambda}$, будучи суммой таких матриц, имеет диагональные элементы, удовлетворяющие условию (24). Это доказывает неравенство.

Равенство сохраняется, только если все матрицы

$$\sum_\gamma S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma}S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\gamma\lambda}$$

могут быть одновременно приведены к собственным осям и их собственные числа пропорциональны (т. е. все такие матрицы отличаются лишь умножением на скалярный множитель). Если все три собственных значения таких матриц различны, то в этих же осях диагональны и матрицы $A_{\beta\gamma} = S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma}$. Принимая во внимание, что $A_{\beta\beta} = 0$, получим, что

$$S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}\beta\gamma} = S'_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{N-2}} A_{\beta\gamma}.$$

Но чтобы свертка S по α_1 и β была равна нулю, необходимо, чтобы у матрицы A было нулевое собственное число.

Есть только два набора из трех собственных чисел для матриц $A_{\beta\gamma}$, среди которых два равны по модулю, а сумма всех трех равна нулю. Случай, при котором знаки собственных чисел совпадают, аналогичен уже разобранному, так как опять все матрицы $A_{\beta\gamma}$ можно диагонализовать в одной системе координат. Остается один вариант, при котором одно из собственных чисел равно нулю, а два других противоположны. В этом случае в выбранной системе координат

$$T_{\beta\gamma} \propto \mu_\beta\nu_\gamma + \nu_\beta\mu_\gamma = S^1_{1,\beta}S^{-1}_{1,\gamma} + S^{-1}_{1,\beta}S^1_{1,\gamma}.$$

Взяв для S разложение вида (3), получим для коэффициента при $a_\beta a_\gamma = S^0_1 S^0_1$ в выражении для $T_{\beta\gamma}$:

$$\frac{1}{2^{N-1}} \sum_{k=1-N}^{N-1} (-1)^k C^{N-1+k}_{2N-2} A_k A_{-k} = 0.$$

Поскольку $A_{-k} = (-1)^k A^*_k$, при $|k| < N$ получим $A_k = 0$. Окончательно имеем

$$S_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N} = A\mu_{\alpha_1}\ldots\mu_{\alpha_N} + (-1)^N A^*\nu_{\alpha_1}\ldots\nu_{\alpha_N}.$$

Для такого тензора равенство выполняется.

Используя доказанное неравенство, с помощью похожего приема можно доказать, что для произвольных k и l

$$\left(S_{\alpha_1\ldots\alpha_k\beta_1\ldots\beta_l} S_{\alpha_1\ldots\alpha_{k+l}}\right)^2 \le \frac{1}{2}\left(S^2_{\alpha_1\ldots\alpha_{k+l}}\right)^2,$$

а равенство достигается, если выбором осей координат тензор S можно привести к виду (9).

Таким образом, для произвольного ранга N на фазовой диаграмме есть область, в которой решение имеет вид (9), что соответствует спиновой группе D_{nh}.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, И. А. Грищук, ЖЭТФ **84**, 467 (1984).
2. В. И. Марченко, Письма в ЖЭТФ **48**, 387 (1988).
3. V. Barzykin, L. P. Gorkov, and A. V. Sokol, Europhys. Lett. **15**, 869 (1991).
4. T. C. Lubensky and L. Radzihovsky, Phys. Rev. E **66**, 031704 (2002).
5. А. М. Фарутин, В. И. Марченко, ЖЭТФ **127**, 1106 (2005).
6. А. М. Фарутин, Письма в ЖЭТФ **87**, 561 (2008).