

二级相变理论和 Lifshitz 条件不成立的论证*

沈 觉 涟

(中国科学院物理研究所)

提 要

系统的自由能是序参量的泛函。在二级相变点附近,自由能密度是序参量及其关联项的幂次展式。按本文给定的方法,无论关联项是定域还是非定域的,由对自由能的一级变分等于零,都能求得表示平衡态位形的序参量。在求解过程中,必须将序参量进行傅氏变换,这与序参量以系统对称群的基函数展开是一致的,由此对二级相变中对称改变进行了分析。

利用变分法中极值的充要条件(或充分条件),我们讨论了二级相变过程中状态的稳定性条件。由于我们对自由能求极值时没有略去关联项,因此不存在 Lifshitz 的对称改变限制条件。这里强调指出:实质上, Lifshitz 的做法是略去关联项以求得自由能的极小解,而当讨论这个解的稳定性时又考虑了关联项,这是一种不自洽的做法。另外,有些系统的序参量(如一分量轴矢)不能构成产生 Lifshitz 条件的关联项,而 Lifshitz 等人的分析,也给这些系统加上了限制条件,这显然是不合理的。

用上述的一般理论,我们解释了重镧系金属在 Neél 点相变的实验结果。用 Lifshitz 条件则不能解释这些二级相变现象。

一、引 言

Lifshitz^[1-3] 讨论 Landau 二级相变理论时,由晶体状态的稳定性要求,提出了晶体二级相变对称改变的一个限制条件,称为 Lifshitz 条件,被人们不断地应用和发展,并推广应用到磁性晶体相变^[4-6]、位移相变^[7]等。后来,发现这一限制条件与重镧系金属在 Neél 点的相变实验结果相矛盾,于是 Dimmock^[8] 主张去掉这一限制条件,他认为:晶体的序参量密度函数 $\rho(\mathbf{r})$ 由空间群不可约表示的基函数展开,其展开系数如果是坐标变化的函数,那末展式不是唯一确定的,不能表示物理系统性质。由于他没有注意到自由能是序参量的泛函,他反对 Lifshitz 条件的理由是不能成立的。另外, Dzyaloshinskii^[9] 提出:在 Lifshitz 条件所允许的结构上作一个微扰,即叠加上一个长周期的超结构。但他得到 Neél 点以下 MnO_2 等磁性结构与实验不符。由于问题没有解决,至今人们仍然采用和研究 Lifshitz 条件。

为了解决这个问题,本文对 Landau 理论加以修改,采用的系统自由能是序参量的泛函,在二级相变点附近,自由能密度是序参量及其关联项的幂次展式,对自由能一级变分等于零,无论序参量的关联项是定域还是非定域的,按本文给定的方法均能求得作为极值曲线的序参量,即可求得系统平衡态的位形。这与 Landau 原来理论中略去序参量的关联

* 1977 年 7 月 6 日收到。

项决定平衡态的位形不同。现在的理论中,关联项对决定平衡态位形和临界温度一般都起重要作用。应该指出:在液晶的一级相变理论中,de Gennes^[10]已用了序参量对坐标的微商项参与决定胆甾(cholesterics)态螺旋位形波矢和过冷温度。我们在求得表示平衡态位形的序参量过程中,必须将序参量进行傅氏变换,它与序参量以系统对称群的基函数展开是一致的,这样我们同时进行了二级相变中对称改变的分析。

利用变分法中极值的充要条件(或充分条件),讨论了二级相变过程中状态的稳定性条件。由于我们对自由能求极值时没有略去关联项,因此不存在 Lifshitz 的限制条件。这里应该指出:实质上, Lifshitz 的做法是略去关联项,求得自由能的极小解;然后,讨论这个解是否是有关联项的自由能泛函的极小解,这种做法是不自洽的。另外,有些系统的序参量(如一分量轴矢)不能构成产生 Lifshitz 条件的关联项,而 Lifshitz 等人的分析,也给这些系统加上了限制条件,这显然是不合理的。

用上面阐述的理论,我们解释了重镧系金属在 Neel 点相变的实验结果。

二、二级相变平均场理论

Landau 二级相变的唯象理论,用序参量表征系统的有序化程度,对于各种物理系统的相变用不同的序参量描述。例如:晶体相变用平均密度函数 $\rho(\mathbf{r})$;磁性晶体相变用平均磁矩密度函数 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 等等。描述的方法很类似,仅要求序参量在相变点温度 T_c 以上消失,以及接近 T_c 附近连续地随温度改变。因此,在相变点附近自由能密度可用序参量及其关联项幂次展式表示。不失一般性,以二分量向量(或轴向量)的序参量 $\mathbf{e}(\mathbf{r}) = (\varepsilon_x(\mathbf{r}), \varepsilon_y(\mathbf{r}))$ 描述的系统为例,自由能为

$$F = \int \left\{ f'(\varepsilon_x, \varepsilon_y, T) + A \left(\varepsilon_x \frac{\partial \varepsilon_y}{\partial z} - \varepsilon_y \frac{\partial \varepsilon_x}{\partial z} \right) + B (\nabla \varepsilon_x \cdot \nabla \varepsilon_x + \nabla \varepsilon_y \cdot \nabla \varepsilon_y) \right\} dV, \quad (1)$$

其中

$$f'(\varepsilon_x, \varepsilon_y, T) = f_0 + a(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + b(\varepsilon_x^4 + \varepsilon_y^4) + c\varepsilon_x^2\varepsilon_y^2 + \dots \quad (1.1)$$

Landau 假定(1)式展开系数是温度等的解析函数,并略去以 A, B 为系数的关联项,于是一级变分 $\delta F = 0$ 退化为对 f' 求函数极值的问题,

$$\frac{\partial f'}{\partial \varepsilon_x} = 0, \quad \frac{\partial f'}{\partial \varepsilon_y} = 0. \quad (2)$$

由方程组(2)确定序参量。因相变点以上自由能极小发生在 $\mathbf{e}(\mathbf{r}) = 0$, 故有 $a(T > T_c) = 0$ 。在 T_c 以下, $\mathbf{e}(\mathbf{r}) = 0$ 虽是 f' 的逗留点,但不是极小点。因此在 T_c 附近有

$$a = a'(T - T_c), \quad a' > 0. \quad (3)$$

要确定相变过程中状态是稳定的,要求在 T_c 附近对于方程组(2)的解有

$$\frac{\partial^2 f'}{\partial \varepsilon_x^2} > 0, \quad \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f'}{\partial \varepsilon_x^2} & \frac{\partial^2 f'}{\partial \varepsilon_x \partial \varepsilon_y} \\ \frac{\partial^2 f'}{\partial \varepsilon_y \partial \varepsilon_x} & \frac{\partial^2 f'}{\partial \varepsilon_y^2} \end{vmatrix} > 0. \quad (4)$$

同时,还要求方程组(2)的解是泛函(1)式的强极小解。附录一用变分法充要条件

证明了: 由于 F 中 A 系数项的存在, 方程组 (2) 的解不是泛函 F 的极小解. 实质上, Lifshitz 等人由此确定这种情况下二级相变不能发生. 不同于 Landau 的理论, 我们以后都不略去序参量的关联项, 如果这样由 $\delta F = 0$ 求得序参量, 在 T_c 附近可使泛函 F 成为强极小, 这时 T_c 由下式决定:

$$a - \frac{A^2}{4B} = a'(T - T_c). \quad (5)$$

(1) 式中序参量关联项是定域的, 由附录一可见, 如果 A 系数项不存在, 方程组 (2) 的解可使泛函 F 成为强极小. 这种情况下 F 描述的系统是均匀的, 如 Heisenberg 近邻交换作用的铁磁体, 而 (1) 式 F 描述的系统非均匀性很小, 系统在 T_c 以下是小波矢 k_0 的螺旋位形结构, 类似于液晶中胆甾态 ($k_0 a \approx 10^{-3}$). 对于物理系统是非均匀的, 或者相互作用不是近程的, 自由能密度中关联项将是非定域的, 这是很普遍的情况. 例如: 二元合金和多元合金; 轴向反铁磁体; 具有螺旋位形的反铁磁体等等. (1) 式的自由能将由下式代替:

$$F = \int \{ f'(\varepsilon_x, \varepsilon_y, T) + \int [A(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\varepsilon_x(\mathbf{r})\varepsilon_y(\mathbf{r}') - \varepsilon_x(\mathbf{r}')\varepsilon_y(\mathbf{r})) + B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\varepsilon_x(\mathbf{r})\varepsilon_x(\mathbf{r}') + \varepsilon_y(\mathbf{r})\varepsilon_y(\mathbf{r}'))] dV' \} dV, \quad (6)$$

$$f'(\varepsilon_x, \varepsilon_y, T) = f_0 + a(\varepsilon_x^2(\mathbf{r}) + \varepsilon_y^2(\mathbf{r})) + b(\varepsilon_x^4(\mathbf{r}) + \varepsilon_y^4(\mathbf{r})) + c\varepsilon_x^2(\mathbf{r})\varepsilon_y^2(\mathbf{r}) + \dots \quad (6.1)$$

在系统基本上是均匀的情况下, (6) 式 F 将变成 (1) 式的自由能. 不失一般性, 我们将以重镧系金属 Dy 等在 Neél 点的相变讨论为例, 说明 (6) 式中 $A(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 系数项存在时二级相变仍可发生, 在非均匀系统相变理论中 Lifshitz 条件也是不存在的.

不论是均匀还是非均匀系统, 自由能中序参量的关联项都是表示系统相互作用的^[9,10], 例如: $B(\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2$ 表示 Heisenberg 交换作用. 另外, 应该指出: 如果序参量是一分量向量(或一分量轴向量) $\varepsilon_x(\mathbf{r})$, 那末在 (1) 式或 (6) 式中都不能构成 A 系数项, 显然 Lifshitz 条件是不能存在的.

三、二级相变中对称改变的分析

为了求得 (1) 式或 (6) 式自由能的极小解, 进一步讨论二级相变平均场理论中不存在 Lifshitz 条件, 必须对二级相变中对称改变进行分析.

序参量反映了系统的对称性, 二级相变序参量改变时, 物理系统的对称性同时改变. 首先, 我们引用 Landau 关于相变时对称改变的分析方法, 在不考虑自由能中序参量关联项的情况下, 以讨论磁性晶体二级相变对称的改变为例.

磁性晶体二级相变用的序参量是平均磁矩 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, 在 $T \geq T_c$ 时, 磁性晶体处于顺磁状态 $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 0$, 磁性晶体具有 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 群的对称性, $\mathbf{G}$ 是磁性晶体的晶体空间群, $\mathbf{R}$ 是时间反演算符. $T < T_c$ 时, 磁性晶体出现异于零的 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 形成一个轴矢量场, 在空间群 $\mathbf{G}$ 的元素 g 作用下, 以及 $\mathbf{R}\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -\mathbf{M}(\mathbf{r})$, 轴矢量 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 可以展开^[5]:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_i^{km} \mathbf{S}_i \varphi_i^{km}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

上式重复指标表示求和, $\mathbf{S}_i$ 是轴矢单位矢, i 为 x, y, z , 它按轴矢量表示 V 变换.

$\varphi_i^{km}(\mathbf{r})$ 是空间群第 $\{\mathbf{k}\}$ 个星第 m 个不可约表示第 i 个分量,其不可约表示以 $T^{(k,m)}$ 表示, $S_i \varphi_i^{km}(\mathbf{r})$ 按群 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 的表示 $V \times T^{(k,m)}$ 变换, $V \times T^{(k,m)}$ 可以分解为不可约表示,相应地分解 $S_i \varphi_i^{(k,m)}(\mathbf{r})$ 为群的不变子空间, $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 可写成 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 群不可约表示基的展式:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_i^n \phi_i^n(\mathbf{r}). \quad (8)$$

(8)式中 n 是不可约表示的标号, i 是基函数分量的标号. 显然, $\phi_i^n(\mathbf{r})$ 是 $S_i \varphi_i^{km}(\mathbf{r})$ 的线性组合,相应的 c_i^n 是 c_i^{km} 的线性组合. 因为 $\phi_i^n(\mathbf{r})$ 与 c_i^n 是对偶的,可认为 $\phi_i^n(\mathbf{r})$ 不变,而 c_i^n 按 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 群的第 n 个不可约表示第 i 个分量变换. 由于相变过程中 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 是连续改变的,所以系数 c_i^n 在相变点附近取任意小的值,以及自由能密度在 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 群诸元素作用下不变, f 可以展开为

$$f = f_0(T) + \sum_{ni} A^{(n)}(T) c_i^{(n)^2} + \sum_{na} A^{(n)}(T) f_a^{(n,4)}(c_i^n) + \dots \quad (9)$$

(9)式已用了 $\mathbf{R} c_i^{(n)} = -c_i^{(n)}$, 故没有奇次不变量, $f_a^{(n,4)}$ 表示群 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 第 n 个不可约表示中第 a 个四次不变量, (9)式中如果所有的 $A^{(n)} > 0$, f 的极小条件要求 $c_i^{(n)}$ 全为零, $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 0$; 如果要求相变后 $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \neq 0$, 则要求 $A^{(n)}$ 之一在相变点附近反号,在相变点这一系数为零,如 $A^{(1)}(T) = 0$. (9)式将变成仅以 $c_i^{(1)}$ 不变量的展式,以后略去 $c_i^{(1)}$ 的上标.

由自由能密度的极小条件求得 c_i , 用(8)式 $\phi_i(\mathbf{r})$ 与 $S_i \varphi_i(\mathbf{r})$ 的关系,就可确定相变后的磁结构. 在参考文献[11]给出的方法可求得 $S_i \varphi_i(\mathbf{r})$ 具体形式(附录二). 这里指出: 作者在参考文献[11]中,阐述 Lifshitz 条件是不必要的一段理由也不能成立.

Lifshitz 认为: 要使状态稳定,还必须使自由能对于 c_i 在整个磁性晶体内部随坐标缓慢的变化来讲成为极小值. 自由能密度不仅依赖于 c_i , 而且依赖于 c_i 对坐标的微商,状态的稳定条件就是 $\frac{\partial c_i}{\partial x_j} (j = 1, 2, 3)$ 都为零时, (9)式 f 的函数极小是泛函 $\int f\left(c_i, \frac{\partial c_i}{\partial x_j}, \right.$

$\left. T\right) dV$ 的强极. 由附录一可以看出, 状态稳定条件是自由能中 $c_i \frac{\partial c_i'}{\partial x_j} - c_i' \frac{\partial c_i}{\partial x_j}$ 等量不能构成线性不变量,即 c_i 等对应的不可约表示 τ 的反对称乘积表示 $\{\tau\}^2$ 不能含群的向量表示,这一条件使得二级相变对称改变的可能性大为缩小,一般称为 Lifshitz 条件. 以后将 c_i 在晶体内部为常数的状态称为“均匀态”, c_i 随坐标变化的状态称为“非均匀态”.

Lifshitz 的讨论已稍稍地偏离了 Landau 关于自由能是序参量泛函的出发点,这不仅由于略去自由能中关联项,得到具有(1)式或(6)式 F 的系统不能发生二级相变的不合理结论,而且对于有些系统的序参量不能构成 A 系数项的情况,由 Lifshitz 条件也得到系统不能发生二级相变的结论,这显然是不合理的. 如镧系金属 Er, Tm 等在 T_N 点的相变,系统的序参量为一分量轴矢 $\mathbf{M}_z(\mathbf{r})$, 在自由能中不可能形成 A 系数项,由 Lifshitz 条件,我们却得到“参与”相变的群不可约表示 τ 的 $\{\tau\}^2$ 含有向量 z 的表示(见附录二 (A19, A20) 式).

我们进行二级相变中对称改变的分析,由 Landau 理论的基本出发点出发,即从系统的自由能是序参量的泛函的观点出发,并且在决定系统平衡态位形时不略去关联项.

在(7)式中 $\varphi_i^{km}(\mathbf{r})$ 是所讨论的磁性晶体空间群基 Bloch 函数, $\varphi_i^{km}(\mathbf{r}) = u_i^{km}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$,

$u_i^{km}(\mathbf{r})$ 是晶体的周期性函数, $u_i^{km}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} v_i^m(\mathbf{k} + \mathbf{K}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}}$, $\mathbf{K}$ 是倒格矢. 如讨论限制在第一布里渊区, $u_i^{km}(\mathbf{r})$ 可用 1 代替^[2]. (7)式改写为

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = c_{ii}^{km} v_i^m(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \mathbf{S}_i e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}}. \quad (10)$$

对上式中 m, i 完成求和, $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ 改记为 $\mathbf{k}$, (10)式变成 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 的傅氏变换:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, i} m^i(\mathbf{k}) \mathbf{S}_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (11)$$

如将(11)式进行变换: $\mathbf{S}^+ = \mathbf{S}_x + i\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}^- = \mathbf{S}_x - i\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}_z = \mathbf{S}_z$, 相应的 $m_k^+ = \frac{1}{2}(m_k^x + im_k^y)$, $m_k^- = \frac{1}{2}(m_k^x - im_k^y)$, $m_k^z = m_k^z$. 那么(11)式就写为

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} (m_k^+ \mathbf{S}^- + m_k^- \mathbf{S}^+ + m_k^z \mathbf{S}_z) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (12)$$

这样将(7),(8)式与 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 的傅氏变换联系起来了,这本来也是显而易见的.

由类似于(1)式或(6)式的自由能出发,将序参量进行傅氏变换,自由能由坐标空间变到准动量空间,在发生二级相变时,准动量空间具有一个或几个波矢的模式之一被凝聚,其余的模式均消失,对这样得到的自由能求极小,就确定了临界波矢和凝聚模式. 临界波矢属于相变点以上系统对称群的一个 $\{\mathbf{k}\}$ 星之中,凝聚模式由该 $\{\mathbf{k}\}$ 星中群的某一不可约表示的基或部分基所决定. 由(8)式或(11),(12)式, $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 的表达式,基函数与分量是对偶的,凝聚模式就可由这些基的分量所决定.

因为自由能密度中序参量的关联项表示系统的相互作用,这些项前面的系数可以给定,求自由能的极小值,使得我们可以决定哪一种模式被凝聚.

用上述方法,由对自由能的一级变分为零,我们求得序参量的准确解,而后用附录一的方法或泛函极值的充分条件,证明这个解使自由能达到泛函强极小,即证明了系统状态的稳定性. 由附录一和下两节相变的例子,我们都可以看到:即使相变中凝聚的模式对应的群表示 τ 的 $\{\tau\}^2$ 含群的向量表示,系统状态仍然可能稳定.

四、重镧系金属在 Neél 点的相变

由以上三节的论述,作为一个例子讨论一下重镧系金属在 Neél 点的二级相变.

先叙述一下实验结果. 在现在讨论的温度范围中,重镧系金属是六角密堆积点阵结构,空间群为 D_{6h}^1 , 原胞中粒子位置为: $A_1\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}\right)$, $A_2\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}\right)$ (见图 1), 它们的中子衍射实验结果列表 1 如下^[12,13]:

表中 T_c , T_N 分别表示铁磁到反铁磁的转变温度和 Neél 温度, $\mu_{\perp}$, $\mu_{\parallel}$ 分别表示与 z 轴垂直和平行的磁矩. Dy 等螺旋结构在晶体同层原子磁矩平行,两层之间磁矩夹角为表上转角. 在 Neél 点的重镧系金属二级相变的实验结果以 Dy 为例^[14],由图 2 给出在 87K 和 179K 发生相变时比热的跳跃,图 3 给出 Dy 的熵随温度的变化曲线,由比热的奇异性特点和熵在相变点的连续变化,可断定 Dy 在 179K 发生二级相变,而在 87K 熵发生跳跃性变化,属于一级相变.

表1 Tb, Dy, Ho, Er, Tm 的中子衍射实验结果
(据 Koehler, Wilkinson, Wollan 和 Coble)

			T_c		T_N
Tb	T		223K		230K
	$\mu_{\parallel}$	0		0	0
	$\mu_{\perp}$	铁		螺旋	0
	转角		18°	—————→	20°
Dy	T		87K		179K
	$\mu_{\parallel}$	0		0	0
	$\mu_{\perp}$	铁		螺旋与温度成线性关系	0
	转角		26.5°	—————→	43.2°
Ho	T		19K	35K	122K(133K)
	$\mu_{\parallel}$	铁 $2.0\mu_B$		0	0
	$\mu_{\perp}$	螺旋 $9.8\mu_B$		螺旋	螺旋与温度成线性关系
	转角	30°	36°	36°	50°
Er	T		20K	52K	80K
	$\mu_{\parallel}$	铁 $7.2\mu_B$		振荡	振荡
	$\mu_{\perp}$	螺旋 $4.1\mu_B$		螺旋与温度成线性关系	0
	周期	(30°)	4.1c, 4.0c	3.5c	3.5c
Tm	T		38K		56K
	$\mu_{\parallel}$	反相		振荡	0
	$\mu_{\perp}$	0		0	0
	周期		3.5c	—————→	3.5c

括号中的数据是第二种试样

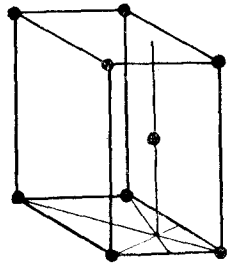


图1 重镧系金属磁结构

对于重镧系金属在 Neél 点以下的螺旋结构,螺旋轴与 z 轴一致,所以符合实验情况的 D_{6h} 群的波矢群为 $\hat{C}_{6v}$, 星 $\{k\}$ 为 $(0,0,k_z)$, $(0,0,-k_z)$, 在附录二中给出了它们的四个不可约表示及其基函数;给出了这些表示的反对称乘积表示,它们分别含有 z 向量的群表示,作出了与此相应的不变量;同时还给出了其它各级不变量. 这在以下讨论中是有用的.

先讨论 Dy, Tb, Ho 等在 T_N 点的相变,在 T_N 点以下 Dy 等螺旋位形的波矢 k_{0z} 不是小量,磁性晶体这时不具有中心反演对称性^[15]. Dy 等螺旋位形在 z 方向平均磁矩为零,(12)式的序参量改写为

$$M(r) = m^+(r)S^- + m^-(r)S^+. \quad (13)$$

相当于(6)式的自由能为

$$F = \int dV = \int \frac{1}{2V} \{ [a(m^+(r)m^-(r) + m^+(r')m^-(r')) + b((m^+(r)m^-(r))^2 + (m^+(r')m^-(r'))^2) + \frac{1}{3} b_3((m^+(r)m^-(r))^3 + (m^+(r')m^-(r'))^3) + \dots$$

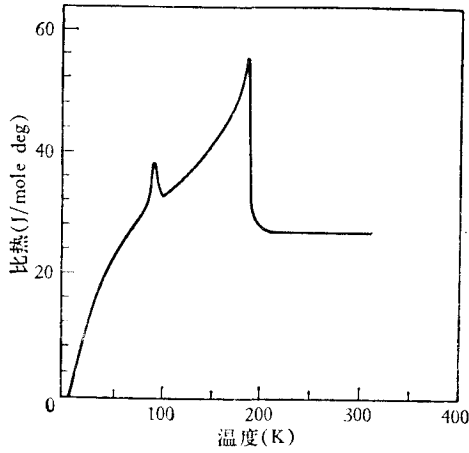


图2 Dy 比热与温度的关系

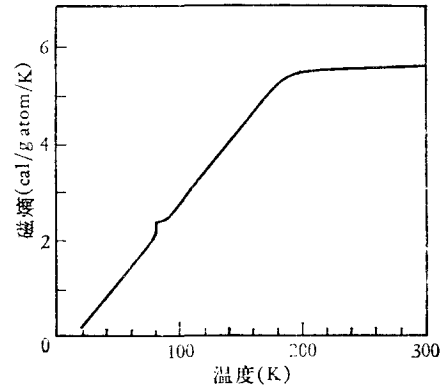


图3 Dy 的磁熵与温度的关系

$$\begin{aligned}
 & + \frac{2}{n} b_{n/2} ((m^+(\mathbf{r})m^-(\mathbf{r}))^{n/2} + (m^+(\mathbf{r}')m^-(\mathbf{r}'))^{n/2}) + \frac{2}{n} b'_{n/2} (m^{+n}(\mathbf{r}) + m^{-n}(\mathbf{r}) \\
 & + m^{+n}(\mathbf{r}') + m^{-n}(\mathbf{r}')) + \frac{A(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2} [m^+(\mathbf{r})m^-(\mathbf{r}') - m^-(\mathbf{r})m^+(\mathbf{r}')] \\
 & + \frac{A^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2} [m^+(\mathbf{r}')m^-(\mathbf{r}) - m^-(\mathbf{r}')m^+(\mathbf{r})] \\
 & + \frac{B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2} (1 - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) m^+(\mathbf{r})m^-(\mathbf{r}') \\
 & + \frac{B(\mathbf{r}' - \mathbf{r})}{2} (1 - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) m^+(\mathbf{r}')m^-(\mathbf{r}) \} dV' dV. \quad (14)
 \end{aligned}$$

(14)式中 n 是偶数,如果临界波矢是 $(0,0,k_{0z})$, $e^{in k_{0z} z}$ 中 z 在晶体 A_1, A_2 位置时有: $e^{in k_{0z} z} = 1$ [见(A18)式]. 式中 $A(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 与 $A^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 互为复数共轭,是无中心反演的反对称交换作用系数,由于自由能密度的实性和 $\mathbf{r}$ 与 $\mathbf{r}'$ 交换不变性,有如下关系:

$$\begin{aligned}
 A(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= -A^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), & A(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= -A(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \\
 B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= B(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (15)
 \end{aligned}$$

对(14)式作傅氏变换:

$$\begin{aligned}
 m^+(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int m_{\mathbf{k}}^+ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k, & m^-(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int m_{-\mathbf{k}}^- e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k, \\
 A(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 k, & B(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int B(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 k. \quad (16)
 \end{aligned}$$

(15)式在准动量空间为 $A(\mathbf{k}) = -A^*(-\mathbf{k})$, $A(\mathbf{k}) = -A(-\mathbf{k})$, $B(\mathbf{k}) = B(-\mathbf{k})$. 将准动量空间自由能过渡到分立值,由

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int (\quad) d^3 k \Rightarrow \sum_{\mathbf{k}} (\quad). \quad (17)$$

那末(14)式变成

$$F = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} [a m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- + 2A(-\mathbf{k}) m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- + (B(\mathbf{k}) - B(0)) m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-] \\ + \frac{1}{V^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} b m_{\mathbf{k}_1}^+ m_{-\mathbf{k}_2}^- m_{\mathbf{k}_3}^+ m_{-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3}^- + \cdots. \quad (18)$$

在(18)式中, 由于序参量 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 无中心反演对称, 有 $m^+(\mathbf{r}) \equiv m^+(-\mathbf{r})$, $m^-(\mathbf{r}) \equiv m^-(-\mathbf{r})$, 即 $m_{\mathbf{k}}^+ \equiv m_{-\mathbf{k}}^+$, $m_{\mathbf{k}}^- \equiv m_{-\mathbf{k}}^-$. 又因 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 是实性的, 得到 $m_{\mathbf{k}}^+ = (m_{-\mathbf{k}}^-)^*$, $m_{\mathbf{k}}^- = (m_{-\mathbf{k}}^+)^*$. 并将(18)式 $\frac{1}{V} m_{\mathbf{k}}^+$ 记为 $m_{\mathbf{k}}^+$, $\frac{1}{V} m_{-\mathbf{k}}^-$ 记为 $m_{-\mathbf{k}}^-$, 再假定只有一个波矢

$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 的模式可被凝聚, 其余模式均消失, 得到自由能的密度为

$$f = a m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- + 2A(-\mathbf{k}) m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- + (B(\mathbf{k}) - B(0)) m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- + b (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^2 \\ + \frac{1}{3} b_3 (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^3 + \cdots + \frac{2}{n} b_{n/2} (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^{n/2} + \frac{1}{n} b'_{n/2} (m_{\mathbf{k}}^{+n} + m_{-\mathbf{k}}^{-n}). \quad (19)$$

为了确定临界波矢和凝聚模式, 对(19)式 f 求极值得

$$\frac{\partial f}{\partial m_{\mathbf{k}}^+} = (a + 2A(-\mathbf{k}) + B(\mathbf{k}) - B(0)) m_{-\mathbf{k}}^- + 2b (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-) m_{-\mathbf{k}}^- b_3 (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^2 m_{-\mathbf{k}}^- + \cdots \\ + b_{n/2} (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^{\frac{n}{2}-1} m_{-\mathbf{k}}^- + b'_{n/2} m_{\mathbf{k}}^{+n-1} = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial m_{-\mathbf{k}}^-} = (a + 2A(-\mathbf{k}) + B(\mathbf{k}) - B(0)) m_{\mathbf{k}}^+ + 2b (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-) m_{\mathbf{k}}^+ b_3 (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^2 m_{\mathbf{k}}^+ + \cdots \\ + b_{n/2} (m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^-)^{\frac{n}{2}-1} m_{\mathbf{k}}^+ + b'_{n/2} m_{-\mathbf{k}}^{-n-1} = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial k_x} = [2A_{k_x}(-\mathbf{k}) + B_{k_x}(\mathbf{k})] m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial k_y} = [2A_{k_y}(-\mathbf{k}) + B_{k_y}(\mathbf{k})] m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial k_z} = [2A_{k_z}(-\mathbf{k}) + B_{k_z}(\mathbf{k})] m_{\mathbf{k}}^+ m_{-\mathbf{k}}^- = 0. \quad (20)$$

方程组(20)中 $A_{k_z}(-\mathbf{k})$, $B_{k_z}(\mathbf{k})$ 分别表示 $A(-\mathbf{k})$, $B(\mathbf{k})$ 对 k_z 的一次偏微商, 其余类推. 若系统相互作用系数 A, B 给定后, 由方程组(20)后三个方程可解出临界波矢. 现按实验结果假定解为 $k_x = 0$, $k_y = 0$, $k_z = k_{0z}$. 方程组(20)有解:

$$\text{i) } k_x = 0, k_y = 0, k_z = k_{0z}; m_{k_{0z}}^+ = 0, m_{-k_{0z}}^- = 0.$$

$$\text{ii) } k_x = 0, k_y = 0, k_z = k_{0z}; m_{k_{0z}}^+ = m_{-k_{0z}}^- = c, c \text{ 为实数.}$$

$$m_{k_{0z}}^+ m_{-k_{0z}}^- = c^2 = \frac{-(a + 2A(-k_{0z}) + B(k_{0z}) - B(0))}{2b} \\ - \frac{1}{2b} [b_3 c^4 + \cdots + b_{n/2} c^{n-2} + b'_{n/2} c^{n-2}]. \quad (21)$$

解(21)式相当于具有临界波矢 $(0, 0, k_{0z})$ 的一种模式被凝聚. 这一模式由(12)式中基函数 $\mathbf{S}^+ e^{ik_{0z}z}$, $\mathbf{S}^- e^{-ik_{0z}z}$ 和其分量所决定, 即由附录二中表示 T_{M_1} 的部分基 $\mathbf{S}^+ e^{ik_{0z}z}$ 和

$S^- e^{-ik_{0z}z}$ 所决定, 凝聚模式为

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 2c(\cos k_{0z}z \cdot \mathbf{S}_x + \sin k_{0z}z \cdot \mathbf{S}_y). \quad (22)$$

解(21)式为(19)式 f 的极小充要条件是 $d^2f > 0$.

$$\begin{aligned} d^2f = \frac{1}{2!} & \left\{ \left(\frac{\partial^2 f}{\partial m_{\mathbf{k}}^{+2}} dm_{\mathbf{k}}^{+2} + \frac{\partial^2 f}{\partial m_{-\mathbf{k}}^{-2}} dm_{-\mathbf{k}}^{-2} + \frac{\partial^2 f}{\partial k_x^2} dk_x^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial k_y^2} dk_y^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial k_z^2} dk_z^2 \right) \right. \\ & + 2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial m_{\mathbf{k}}^{+2} \partial m_{-\mathbf{k}}^{-2}} dm_{\mathbf{k}}^{+2} dm_{-\mathbf{k}}^{-2} + \frac{\partial^2 f}{\partial k_x \partial k_y} dk_x dk_y + \frac{\partial^2 f}{\partial k_x \partial k_z} dk_x dk_z \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial^2 f}{\partial k_y \partial k_z} dk_y dk_z \right) \right\} > 0. \end{aligned} \quad (23)$$

在(23)式中已略去为零的项, 令

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial^2 f}{\partial k_x^2}, \quad a_{22} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_y^2}, \quad a_{33} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_z^2}, \quad a_{21} = a_{12} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_x \partial k_y}, \quad a_{13} = a_{31} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_x \partial k_z}, \\ a_{32} &= a_{23} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_y \partial k_z}, \quad a_{44} = a_{55} = \frac{\partial^2 f}{\partial m_{\mathbf{k}}^{+2} \partial m_{-\mathbf{k}}^{-2}} = a + 2A(-\mathbf{k}) + B(\mathbf{k}) - B(0) \\ &+ 4bm_{\mathbf{k}}^{+} m_{-\mathbf{k}}^{-} + 3b_3(m_{\mathbf{k}}^{+} m_{-\mathbf{k}}^{-})^2 + \cdots + \frac{n}{2} b_{n/2}(m_{\mathbf{k}}^{+} m_{-\mathbf{k}}^{-})^{\frac{n}{2}-1}, \\ a_{45} &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_{\mathbf{k}}^{+2}} = 2bm_{-\mathbf{k}}^{-} + 2b_3(m_{\mathbf{k}}^{+} m_{-\mathbf{k}}^{-})m_{-\mathbf{k}}^{-} + \cdots + \left(\frac{n}{2} - 1\right) b_{n/2}(m_{\mathbf{k}}^{+} m_{-\mathbf{k}}^{-})^{\frac{n}{2}-2} m_{-\mathbf{k}}^{-} \\ &+ (n-1)b_{n/2}m_{-\mathbf{k}}^{-\frac{n-2}{2}}, \\ a_{54} &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_{-\mathbf{k}}^{-2}} = (a_{45})^*. \end{aligned}$$

$d^2f > 0$ 的充要条件是以下各行列式代入解(21)式后有

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= a_{11} > 0, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} > 0, \\ \Delta_4 &= \begin{vmatrix} \Delta_3 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & a_{44} \end{vmatrix} > 0, \quad \Delta_5 = \begin{vmatrix} \Delta_3 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & a_{44} & a_{45} \\ \vdots & \vdots & a_{54} & a_{55} \end{vmatrix} > 0. \end{aligned}$$

在 T_N 点附近 $(0, 0, k_{0z})$ 成为临界波矢的条件要求: $\Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \Delta_3 > 0$. 因此, 只要讨论在 T_N 附近有

$$\tilde{\Delta}_1 = a_{44} > 0, \quad \tilde{\Delta}_2 = a_{44}a_{55} - a_{45}a_{54} > 0. \quad (24)$$

对于解(21)式有 $a(T) + B(T, k_{0z}) + 2A(T, -k_{0z}) - B(0) = a'(T)(T - T_N)$, 并假定 $T = T_N$ 附近 $a'(T) > 0$, 那么

$$\begin{aligned} T > T_N: \quad \tilde{\Delta}_1 &= a + 2A(-k_{0z}) + B(k_{0z}) - B(0) > 0; \\ T = T_N: \quad \tilde{\Delta}_1 &= 4bm_{k_{0z}}^{+} m_{-k_{0z}}^{-} = 4b0^{+} > 0; \\ T < T_N: \quad \tilde{\Delta}_1 &= -(a + 2A(-k_{0z}) + B(k_{0z}) - B(0)) > 0; \\ T > T_N: \quad \tilde{\Delta}_2 &= (a + 2A(-k_{0z}) + B(k_{0z}) - B(0))^2 > 0; \\ T = T_N: \quad \tilde{\Delta}_2 &= 12b^2c^4 = 12b^20^{+} > 0; \end{aligned}$$

$T < T_N$: $\tilde{\Delta}_2 = (a + 2A(-k_{0z}) + B(k_{0z}) - B(0) + 6bc^2)(-nb'_{n/2}c^{n-2}) > 0$, 要求 $b'_{n/2} < 0$.

我们是将(14)式的泛函 F 看作含有无穷多个变量的函数后, 由 $\delta F = 0$ 求得解(21)式. 以下证明解(21)式使泛函 F 达到极小, 将(14)式的 F 以 $m^+(\mathbf{r})$, $m^-(\mathbf{r})$, $m^+(\mathbf{r}')$, $m^-(\mathbf{r}')$ 为未知函数进行二级变分; 然后进行傅氏变换, 用(17)式将 $m_{\mathbf{k}}^+$, $m_{\mathbf{k}}^-$ 过渡到分立值, 令 $\frac{1}{V} m_{\mathbf{k}}^+$ 为 $m_{\mathbf{k}}^+$, $\frac{1}{V} m_{\mathbf{k}}^-$ 为 $m_{\mathbf{k}}^-$, 代入解(21)式, 得到

$$\delta^2 F = \frac{1}{2} \frac{V}{2(2\pi)^3} \left\{ (a_{14} + a_{32}) \delta m_{\mathbf{q}_1}^- \delta m_{-\mathbf{q}_1+2\mathbf{k}_{0z}}^- + (a_{41} + a_{23}) \delta m_{\mathbf{q}_1}^+ \delta m_{-\mathbf{q}_1+2\mathbf{k}_{0z}}^+ \right. \\ \left. + (a_{11} + a_{22}) \delta m_{\mathbf{q}_1}^+ \delta m_{\mathbf{q}_1}^- + (a_{33} + a_{44}) \delta m_{-\mathbf{q}_1+2\mathbf{k}_{0z}}^+ \delta m_{-\mathbf{q}_1+2\mathbf{k}_{0z}}^- \right\} d^3 q_1. \quad (25)$$

(25)式中

$$a_{41} = a_{14} = a_{23} = a_{32} = 2bc^2 + 2b_3c^4 + \cdots + \left(\frac{n}{2} - 1\right) b_{n/2}c^{n-2} + (n-1)b'_{n/2}c^{n-2},$$

$$a_{11} = a_{22} = (a + 2A(-\mathbf{q}_1) + B(\mathbf{q}_1) - B(0)) + 4bc^2 + 3b_3c^4 + \cdots + \frac{n}{2} b_{n/2}c^{n-2},$$

$$a_{33} = a_{44} = (a + 2A(\mathbf{q}_1 - 2\mathbf{k}_{0z}) + B(-\mathbf{q}_1 + 2\mathbf{k}_{0z}) - B(0)) + 4bc^2 + 3b_3c^4 + \cdots + \frac{n}{2} b_{n/2}c^{n-2}.$$

解(21)式使泛函 F 达到极小值充分条件为 $\delta^2 F > 0$, 即要求

$$\Delta_1 = a_{11} > 0, \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{vmatrix} > 0, \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} > 0, \Delta_4 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & 0 & 0 & a_{44} \end{vmatrix} > 0. \quad (26)$$

将上式与(24)式联系起来, 又由在 T_N 附近总有 $(a + 2A(-\mathbf{q}) + B(\mathbf{q}) - B(0))|_{\mathbf{q}_1 \neq (0,0,k_{0z})} > 0$, 因此在 T_N 附近有

$$\Delta_1 \geq \tilde{\Delta}_1 > 0, \Delta_2 \geq \tilde{\Delta}_2^2 > 0, \Delta_3 \geq \tilde{\Delta}_1 \cdot \tilde{\Delta}_2 > 0, \Delta_4 \geq \tilde{\Delta}_2^2 > 0. \quad (27)$$

由上所述, 我们已证明了 Dy 等在 T_N 点可以发生二级相变, 这与 Dy 在 179K 发生二级相变的实验结果一致.

至于 Lifshitz 所述的“非均匀态”自由能, 应按附录二的 $\mathbf{G} \times \mathbf{R}$ 群的不变量作出, 例如 $\{T_{M_3} \times T_{M_3}\}$ 含有向量 z 表示的项为 (A15) 式

$$A(z - z')(\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r})\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r}') - \tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r})\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}') + \tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r})\tilde{m}_{-\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}') - \tilde{m}_{-\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r})\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}')). \quad (28)$$

(28) 式中 $\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}) = m_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r})e^{ik_z z}$, $\tilde{m}_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}') = m_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r}')e^{ik_z z}$ 等等. 其中 $m_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r})$, $m_{\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r}')$ 等为坐标的变化函数. 在“均匀态”自由能中 $m_{\mathbf{k}_z}^+(\mathbf{r})$, $m_{\mathbf{k}_z}^-(\mathbf{r}')$ 等变为常量, 又因 $A(z - z') = -A(z' - z)$, 在“均匀态”自由能中(28)式变为

$$2A(-k_z)[m_{\mathbf{k}_z}^+ m_{-\mathbf{k}_z}^- + m_{-\mathbf{k}_z}^+ m_{\mathbf{k}_z}^-]. \quad (29)$$

我们对这种“均匀态”自由能求极小, 解(21)式是其中的解之一. 同样可证明, 解(21)式是“非均匀态”自由能泛函的极小.

对于 E_r, T_m 在 T_N 的相变, 可作完全相同的讨论, 不过这时 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 只有一分量 $m_z(\mathbf{r})$, 因此无反对称交换作用, 且在 T_N 以下磁性晶体是有中心反演对称的, 即 $m^z(\mathbf{r}) = m^z(-\mathbf{r})$, 导致 Lifshitz 条件的项是不可能存在的。

五、基本上均匀的系统相变

如果晶体结构与前相同, 而且基本上是均匀的系统, 可用上节自由能由序参量直接展开的方法, 讨论类似于 Dy 等在 Neél 点的相变, 现在我们采用群论分析来讨论它。对应于附录二 T_{M_3} 的表示时(12)式为

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = m_{k_z}^+ e^{ik_z z} \mathbf{S}^- + m_{k_z}^- e^{ik_z z} \mathbf{S}^+ + m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z} \mathbf{S}^- + m_{-k_z}^- e^{-ik_z z} \mathbf{S}^+. \quad (30)$$

由于 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 的实性, $m_{k_z}^+ = (m_{-k_z}^-)^*$, $m_{k_z}^- = (m_{-k_z}^+)^*$, 又由附录二表示 T_{M_3} 的基构成的各级不变量, 作出“非均匀态”的自由能为

$$\begin{aligned} F = & \left\{ a(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-) + b(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^2 \right. \\ & + 2b(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-) + \frac{1}{3} b_3(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^3 + \dots \\ & + \frac{2}{n} b_{n/2}(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^{n/2} + \frac{1}{n} b'_{n/2}[m_{k_z}^{+n} + m_{-k_z}^{-n} + m_{-k_z}^{+n} + m_{k_z}^{-n}] \\ & + Ai \left[m_{k_z}^+ e^{ik_z z} \frac{\partial m_{-k_z}^- e^{-ik_z z}}{\partial z} - m_{-k_z}^- e^{-ik_z z} \frac{\partial m_{k_z}^+ e^{ik_z z}}{\partial z} \right. \\ & + m_{k_z}^- e^{ik_z z} \frac{\partial m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z}}{\partial z} - m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z} \frac{\partial m_{k_z}^- e^{ik_z z}}{\partial z} \Big] \\ & + B \left[\frac{\partial m_{k_z}^+ e^{ik_z z}}{\partial x} \frac{\partial m_{-k_z}^- e^{-ik_z z}}{\partial x} + \frac{\partial m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z}}{\partial x} \frac{\partial m_{k_z}^- e^{ik_z z}}{\partial x} \right. \\ & + \frac{\partial m_{k_z}^+ e^{ik_z z}}{\partial y} \frac{\partial m_{-k_z}^- e^{-ik_z z}}{\partial y} + \frac{\partial m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z}}{\partial y} \frac{\partial m_{k_z}^- e^{ik_z z}}{\partial y} \\ & \left. + \frac{\partial m_{k_z}^+ e^{ik_z z}}{\partial z} \frac{\partial m_{-k_z}^- e^{-ik_z z}}{\partial z} + \frac{\partial m_{-k_z}^+ e^{-ik_z z}}{\partial z} \frac{\partial m_{k_z}^- e^{ik_z z}}{\partial z} \right] \Big\} dV = \int f dV. \quad (31) \end{aligned}$$

(31) 式中 $m_{k_z}^+$, $m_{-k_z}^-$ 等是坐标慢变函数, 令 $\tilde{m}_{k_z}^+(\mathbf{r}) = m_{k_z}^+ e^{ik_z z}$, $\tilde{m}_{-k_z}^-(\mathbf{r}) = m_{-k_z}^- e^{-ik_z z} \dots$, 那么, 显然含 A 系数项对应于附录二中不变量 (A16) 式, 如果将 A 系数

项微商分成两项, 其中一项为 $iA \left(m_{k_z}^+ \frac{\partial m_{-k_z}^-}{\partial z} - m_{-k_z}^- \frac{\partial m_{k_z}^+}{\partial z} + m_{-k_z}^+ \frac{\partial m_{k_z}^-}{\partial z} - m_{k_z}^- \frac{\partial m_{-k_z}^+}{\partial z} \right)$, 它仍对应于附录二中的不变量 (A16) 式。

若 $m_{k_z}^+$, $m_{-k_z}^-$ 等不是坐标的慢变函数, (31) 式过渡到“均匀态”的自由能:

$$\begin{aligned} f = & a(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-) + b(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^2 \\ & + 2b(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-) + \frac{1}{3} b_3(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^3 \\ & + \dots + \frac{2}{n} b_{n/2}(m_{k_z}^+ m_{-k_z}^- + m_{-k_z}^+ m_{k_z}^-)^{n/2} + \frac{1}{n} b'_{n/2}(m_{k_z}^{+n} + m_{-k_z}^{-n} \end{aligned}$$

$$+ m_{k_z}^{+n} + m_{k_z}^{-n}) + 2Ak_z(m_{k_z}^+ m_{k_z}^- + m_{k_z}^- m_{k_z}^+) + Bk_z^2(m_{k_z}^+ m_{k_z}^- + m_{k_z}^- m_{k_z}^+). \quad (32)$$

求 f 的极小值, 得到解之一为

$$i) \quad m_{k_z}^+ = m_{k_z}^- = m_{k_z}^+ = m_{k_z}^- = 0, \quad k_z = k_{0z} = -A/B.$$

$$ii) \quad m_{k_z}^+ = m_{k_z}^- = 0, \quad k_z = k_{0z} = -\frac{A}{B}, \quad m_{k_z}^+ = m_{k_z}^- = c, \quad c \text{ 为实数.}$$

$$m_{k_z}^+ m_{k_z}^- = c^2 = \frac{-\left(a - \frac{A^2}{B}\right)}{2b} - \frac{1}{2b} [b_3 c^4 + \cdots + b_{n/2} c^{n-2} + b'_{n/2} c^{n-2}]. \quad (33)$$

解(33)式使(32)式自由能 f 极小的充要条件为

$$d^2 f = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+} dm_{k_z}^+ + \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^-} dm_{k_z}^- + \frac{\partial^2 f}{\partial k_z^2} dk_z^2 \right) + 2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+ \partial m_{k_z}^-} dm_{k_z}^+ dm_{k_z}^- + \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+ \partial m_{k_z}^-} dm_{k_z}^+ dm_{k_z}^- \right) \right\} > 0,$$

$$\text{式中 } a_{11} = \frac{\partial^2 f}{\partial k_z^2} = 2Bc^2,$$

$$a_{22} = a_{33} = \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+ \partial m_{k_z}^-} = a + 2Ak_z + k_z^2 B + 4bc^2 + b_3 c^4 + \cdots + b_{n/2} c^{n-2},$$

$$a_{44} = a_{55} = \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+ \partial m_{k_z}^-} = a + 2Ak_z + k_z^2 B + 4bc^2 + 3b_3 c^4 + \cdots + \frac{n}{2} b_{n/2} c^{n-2},$$

$$a_{45} = \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^+} = 2bc^2 + 2b_3 c^4 + \cdots + \left(\frac{n}{2} - 1\right) b_{n/2} c^{n-2} + (n-1)b'_{n/2} c^{n-2},$$

$$a_{54} = \frac{\partial^2 f}{\partial m_{k_z}^-} = a_{45}.$$

$d^2 f > 0$ 的充要条件为

$$\Delta_1 = a_{11} > 0, \quad \Delta_2 = \Delta_1 a_{22} > 0, \quad \Delta_3 = \Delta_1 a_{22}^2 > 0, \quad \Delta_4 = \Delta_3 a_{44} > 0,$$

$$\Delta_5 = \Delta_3 (a_{44} a_{55} - a_{45} a_{54}) > 0.$$

解(33)式中 $a - \frac{A^2}{B} = a'(T)(T - T_N)$, 在 T_N 附近有 $a'(T) > 0$.

在 $T \geq T_N$ 时均有 $\Delta_1 = a_{11} = 2Bc^2 > 0$.

又在准确到 c^2 项, $a_{22} = a_{44}$. $T > T_N$: $a_{22} = a - \frac{A^2}{B} > 0$; $T = T_N$: $a_{22} = 4bc^2 =$

$4b_3 c^4 > 0$; $T < T_N$: $a_{22} = a - \frac{A^2}{B} + 4bc^2 = -\left(a - \frac{A^2}{B}\right) > 0$. 因此, 在 T_N 附近有

$\Delta_2 > 0, \Delta_3 > 0, \Delta_4 > 0$.

在 $T > T_N$ 时, $\Delta_5 = \Delta_3 \left(a - \frac{A^2}{B}\right) > 0$; $T = T_N$: $\Delta_5 = \Delta_3 \cdot 12b^2 c^4 > 0$; $T < T_N$:

$\Delta_5 = \Delta_3 \left(a - \frac{A^2}{B} + 6bc^2\right) (-nb'_{n/2} c^{n-2}) > 0$, 其中 $b'_{n/2} < 0$.

解(33)式表示的凝聚模式与(22)式相同, 即

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = 2c(\cos k_{0z} z \cdot \mathbf{S}_x + \sin k_{0z} z \cdot \mathbf{S}_y).$$

证明解(33)式使“非均匀态”自由能(31)式达到强极小可用附录一所述的泛函极小值充要条件, 现在我们简单地用充分条件讨论. 为了书写方便, 令: $m_{k_z}^+(\mathbf{r})e^{ik_z z} = \tilde{m}_{k_z}^+(\mathbf{r}) = c_1$, $\tilde{m}_{-k_z}^-(\mathbf{r}) = c_1^*$, $\tilde{m}_{k_z}^-(\mathbf{r}) = c_2$, $\tilde{m}_{-k_z}^+(\mathbf{r}) = c_2^*$, 记 $\frac{\partial c_1}{\partial z} = c_{1z}$, $\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} = c_{1zz} \dots$.

由 $\delta F = 0$ 得到尤拉方程, 解(33)式是这个方程组的解之一, 这是显然的. 对于 F 的二级变分为

$$\begin{aligned} \delta^2 F = \frac{1}{2!} & \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial c_1^2} \delta c_1^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial c_1^*} \delta c_1^* + 2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial c_1 \partial c_1^*} \delta c_1 \delta c_1^* + \frac{\partial^2 f}{\partial c_2 \partial c_2^*} \delta c_2 \delta c_2^* \right. \right. \\ & + \frac{\partial^2 f}{\partial c_1 \partial c_{1z}} \delta c_1 \delta c_{1z} + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1z} \partial c_1^*} \delta c_{1z} \delta c_1^* + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2z} \partial c_2^*} \delta c_{2z} \delta c_2^* \\ & + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2z}^* \partial c_2} \delta c_{2z}^* \delta c_2 + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1z} \partial c_{1z}^*} \delta c_{1z} \delta c_{1z}^* + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2z} \partial c_{2z}^*} \delta c_{2z} \delta c_{2z}^* \\ & + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1x} \partial c_{1x}^*} \delta c_{1x} \delta c_{1x}^* + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2x} \partial c_{2x}^*} \delta c_{2x} \delta c_{2x}^* + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1y} \partial c_{1y}^*} \delta c_{1y} \delta c_{1y}^* \\ & \left. \left. + \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2y} \partial c_{2y}^*} \delta c_{2y} \delta c_{2y}^* \right] \right\} dV. \end{aligned} \quad (34)$$

(34)式中

$$\begin{aligned} I &= \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1z} \partial c_{1z}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2z} \partial c_{2z}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1x} \partial c_{1x}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2x} \partial c_{2x}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_{1y} \partial c_{1y}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_{2y} \partial c_{2y}^*} = B, \\ G &= \frac{\partial^2 f}{\partial c_1 \partial c_{1z}^*} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_2 \partial c_{2z}^*} = iA, \quad G^* = \frac{\partial^2 f}{\partial c_1^* \partial c_{1z}} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_2^* \partial c_{2z}} = -iA, \\ P &= \frac{\partial^2 f}{\partial c_1^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial c_1^{*2}} = 2bc^2 + 2b_3c^4 + \dots + b_{n/2} \left(\frac{n}{2} - 1 \right) c^{n-2} + (n-1)b'_{n/2}c^{n-2}, \\ N &= \frac{\partial^2 f}{\partial c_1 \partial c_1^*} = a + 4bc^2 + 3b_3c^4 + \dots + b_{n/2} \cdot \frac{n}{2} \cdot c^{n-2}, \\ S &= \frac{\partial^2 f}{\partial c_2 \partial c_2^*} = a + 4bc^2 + bc^4 + \dots + b_{n/2}c^{n-2}. \end{aligned}$$

$\delta^2 F > 0$ 充分条件为

$$\Delta_1 = I > 0; \Delta_2 = I^2 > 0; \dots \Delta_8 = I^8 > 0; \dots \Delta_{16} = \begin{vmatrix} \Delta_8 & & & & & & & \\ & I & 0 & 0 & 0 & G & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & I & 0 & 0 & 0 & G^* & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & I & 0 & 0 & 0 & G & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & I & 0 & 0 & 0 & G^* \\ & G^* & 0 & 0 & 0 & N & P & 0 & 0 \\ & 0 & G & 0 & 0 & P & N & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & G^* & 0 & 0 & 0 & S & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & G & 0 & 0 & 0 & S \end{vmatrix} > 0.$$

在代入解(33)式后有

$$T \geq T_N: \Delta_1 = B > 0; \Delta_2 = B^2 > 0; \cdots \Delta_{12} = B^{12} > 0.$$

$$\text{又 } T > T_N: \Delta_{13} = B^{12} \left(a - \frac{A^2}{B} + 4bc^2 \right) = B^{12} \left(a - \frac{A^2}{B} \right) > 0;$$

$$T = T_N: \Delta_{13} = B^{12} 4bc^2 = B^{12} 4b0^+ > 0;$$

$$T < T_N: \Delta_{13} = -B^{12} \left(a - \frac{A^2}{B} \right) > 0.$$

$$T > T_N: \Delta_{14} = B^{12} \left(a - \frac{A^2}{B} \right)^2 > 0;$$

$$T = T_N: \Delta_{14} = B^{12} \cdot 12b^2c^2 = 12b^2B0^+ > 0;$$

$$T < T_N: \Delta_{14} = B^{12} \left(a - \frac{A^2}{B} + 6b^2c^2 \right) (-nb'_{n/2}c^{n-2}) > 0, \text{ 其中 } b'_{n/2} < 0.$$

$$T > T_N: \Delta_{15} = \Delta_{14} \left(a - \frac{A^2}{B} \right) > 0;$$

$$T = T_N: \Delta_{15} = \Delta_{14} \cdot 4bc^2 = \Delta_{14} \cdot 4b0^+ > 0;$$

$$T < T_N: \Delta_{15} = \Delta_{14} \cdot \left[- \left(a - \frac{A^2}{B} \right) \right] > 0.$$

$$\text{而 } \Delta_{16} = \Delta_{14} \left(S - \frac{GG^*}{I} \right)^2, \text{ 在 } T \geq T_N \text{ 时均有 } \Delta_{16} > 0.$$

在讨论中,任意的 c_{1x}, c_{1y}, c_{1z} 等均成立,所以解(33)式是使泛函 F 达到强极小的极值曲线.

附 录 一

若系统自由能为

$$F = \int \left\{ f'(\varepsilon_x, \varepsilon_y, T) + A \left(\varepsilon_x \frac{\partial \varepsilon_y}{\partial z} - \varepsilon_y \frac{\partial \varepsilon_x}{\partial z} \right) + B(\nabla \varepsilon_x \cdot \nabla \varepsilon_x + \nabla \varepsilon_y \cdot \nabla \varepsilon_y) \right\} dV = \int f dV, \quad (A1)$$

其中

$$f = f_0 + a(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + b(\varepsilon_x^4 + \varepsilon_y^4) + c\varepsilon_x^2\varepsilon_y^2 + \cdots. \quad (A1.1)$$

由于 F 中 A 系数项的存在,在略去关联项的情况下,相变点附近有 $a = a'(T)(T - T_c)$,由 $\delta F = 0$ 求极值得到的解,一定不能使(1)式泛函 F 在相变点附近达到极小,而不略去关联项,由 $\delta F = 0$ 确定的极值曲线,且关联项参与决定相变点.例如: $a - \frac{A^2}{4B} = a'(T - T_c)$,可使 F 达到强极小.

为了方便起见,在证明时记 $\varepsilon_x = c_1, \varepsilon_y = c_2, \frac{\partial \varepsilon_x}{\partial z} = c_{1z}, \cdots$. 以上论述必须由变分法关于极小的充要条件证明.

1) Legendre 条件

$$f_{c_{1x}c_{1x}} = 2B > 0, \begin{vmatrix} f_{c_{1x}c_{1x}} & 0 \\ 0 & f_{c_{2x}c_{2x}} \end{vmatrix} = (2B)^2 > 0, \cdots$$

$$\begin{vmatrix} f_{c_1 c_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f_{c_2 c_2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_{c_1 c_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_{c_2 c_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & f_{c_1 c_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_{c_2 c_2} \end{vmatrix} = (2B)^6 > 0. \quad (\text{A2})$$

2) Jacobi 条件

由对 F 的二级变分:

$$\begin{aligned} \delta^2 F = & \int \{f_{c_1 c_1} \delta c_1^2 + f_{c_2 c_2} \delta c_2^2 + f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1\} dV \\ & + 2(f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1) dV \\ & + \int (f_{c_1 c_1} \delta c_1^2 + f_{c_2 c_2} \delta c_2^2 + f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1) dV > 0. \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

(A3) 式中

$$\int (f_{c_1 c_1} \delta c_1^2 + f_{c_2 c_2} \delta c_2^2 + f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1) dV \geq 0. \quad (\text{A4})$$

由 (A2) 式的 Legendre 条件 (A4) 式不等式成立, 且只有 $\delta c_1, \delta c_2, \delta c_1, \delta c_2$ 全为零时 (A4) 式作为等式成立. 因此 $\delta^2 F > 0$, 只要求

$$\begin{aligned} \delta^2 F = & \int \{f_{c_1 c_1} \delta c_1^2 + f_{c_2 c_2} \delta c_2^2 + f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1\} dV \\ & + 2(f_{c_1 c_2} \delta c_1 \delta c_2 + f_{c_2 c_1} \delta c_2 \delta c_1) dV = \int \phi dV. \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

在本问题中, 研究 (A3) 式与 (A5) 式得到的 Jacobi 条件是等价的.

令 $\delta c_1 = X, \delta c_2 = Y, f_{c_1 c_1} = f_{c_2 c_2} = \alpha, f_{c_1 c_2} = \beta$, 由 (A5) 式得到 Jacobi 方程为

$$\begin{aligned} \phi_X - \frac{\partial}{\partial z} \{\phi_{X_z}\} &= 0, \\ \phi_Y - \frac{\partial}{\partial z} \{\phi_{Y_z}\} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

即

$$\begin{aligned} BX'' - AY' - \alpha X - \beta Y &= 0, \\ BY'' + AX' - \alpha Y - \beta X &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A6.1})$$

(A6.1) 式中 $X' = \frac{\partial X}{\partial z}, X'' = \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \dots$, 令 (A6.1) 方程组解为

$$X = r_1 e^{\lambda z}, Y = r_2 e^{\lambda z}. \quad (\text{A6.2})$$

(A6.2) 式代入 (A6.1) 式得到

$$\begin{aligned} (B\lambda^2 - \alpha)r_1 - (A\lambda + \beta)r_2 &= 0, \\ (B\lambda^2 - \alpha)r_2 + (A\lambda - \beta)r_1 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A6.3})$$

(A6.3) 式有非零解必须

$$(B\lambda^2 - \alpha)^2 + (A\lambda + \beta)(A\lambda - \beta) = 0. \quad (\text{A6.4})$$

由此得到

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2B} (-\sqrt{(2\alpha B - A^2) - 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} + \sqrt{(2\alpha B - A^2) + 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}}), \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2B} (-\sqrt{(2\alpha B - A^2) - 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} - \sqrt{(2\alpha B - A^2) + 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\lambda_3 &= \frac{1}{2B} \left(+ \sqrt{(2\alpha B - A^2) - 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} + \sqrt{(2\alpha B - A^2) + 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} \right), \\ \lambda_4 &= \frac{1}{2B} \left(+ \sqrt{(2\alpha B - A^2) - 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} - \sqrt{(2\alpha B - A^2) + 2B\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}} \right), \\ r_1 &= 1, \quad r_{2i} = \frac{(B\lambda_i^2 - \alpha)}{A\lambda_i + \beta} \quad (i = 1, 2, 3, 4),\end{aligned}\quad (\text{A6.5})$$

由 (A6.5) 式可知, $\lambda_1 = -\lambda_4$, $\lambda_2 = -\lambda_3$, 得到解

$$\begin{aligned}X_1 &= \cosh \lambda_1 z, \quad X_2 = i \sinh \lambda_1 z, \quad X_3 = \cosh \lambda_2 z, \quad X_4 = i \sinh \lambda_2 z, \\ Y_1 &= -h \cdot \sinh \lambda_1 z + s \cdot \cosh \lambda_1 z, \quad Y_2 = -ih \cdot \cosh \lambda_1 z + is \cdot \sinh \lambda_1 z, \\ Y_3 &= -n \cdot \sinh \lambda_2 z + m \cdot \cosh \lambda_2 z, \quad Y_4 = -in \cdot \cosh \lambda_2 z + im \cdot \sinh \lambda_2 z; \\ h &= \frac{B\lambda_1^2 - \alpha}{\beta^2 - A^2\lambda_1^2} \cdot A\lambda_1; \quad s = \frac{B\lambda_1^2 - \alpha}{\beta^2 - A^2\lambda_1^2} \beta; \\ n &= \frac{B\lambda_2^2 - \alpha}{\beta^2 - A^2\lambda_2^2} \cdot A\lambda_2; \quad m = \frac{B\lambda_2^2 - \alpha}{\beta^2 - A^2\lambda_2^2} \beta.\end{aligned}\quad (\text{A6.6})$$

(A6.4) 方程一般解为

$$\begin{aligned}X &= d_1 X_1 + d_2 X_2 + d_3 X_3 + d_4 X_4, \\ Y &= d_1 Y_1 + d_2 Y_2 + d_3 Y_3 + d_4 Y_4.\end{aligned}\quad (\text{A6.7})$$

由定理^[16]: 如果对于非奇异的极值曲线的 Jacobi 方程四个解 (X_i, Y_i) , 行列式

$$\Delta(z_1, z) = \begin{vmatrix} X_1(z_1) & X_2(z_1) & X_3(z_1) & X_4(z_1) \\ Y_1(z_1) & Y_2(z_1) & Y_3(z_1) & Y_4(z_1) \\ X_1(z) & X_2(z) & X_3(z) & X_4(z) \\ Y_1(z) & Y_2(z) & Y_3(z) & Y_4(z) \end{vmatrix}$$

不恒为零, 那么在极值曲线上点 2 共轭于点 1 是 $\Delta(z_1, z_2) = 0$.

令 $z_1 = 0$, 得到 $\Delta(0, z) = -2h \cdot n(1 - \cosh \lambda_1 z \cdot \cosh \lambda_2 z) + [(m-s)^2 - n^2 - h^2] \sinh \lambda_1 z \cdot \sinh \lambda_2 z$.

略去 (A1) 式 F 中关联项的情况下, 相变点附近有 $a = a'(T)(T - T_c)$, 在相变点时 $\delta F = 0$ 解为 $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 0$, $\alpha = \beta = 0$. 所以 $\Delta(0, z) = 2 \left(1 - \cos \frac{A}{B} z \right)$, 共轭点 $z_2 = \frac{2\pi B}{A}$. 而在 F 中不略去关

联项, 由 $\delta F = 0$ 求得的极值曲线, 且关联项参与决定相变点. 例如 $a - \frac{A^2}{4B} = a'(T - T_c)$, 那

么在相变点时解为 $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 0$, $\beta = 0$, $\alpha = 2a$. 这时, $\Delta(0, z) = -4 \sinh \frac{\sqrt{-A^2 + 4B\alpha}}{2B} z =$

$-4 \sinh \sqrt{\frac{a}{B}} z$, 无共轭点存在. 由于是连续相变, 在相变点附近上述结论同样成立.

3) Weierstrass E 函数大于零

这是显然的. 因为不等式 (A2) 对任意的 $c_{1x}, c_{1y}, c_{1z}, c_{2x}, c_{2y}, c_{2z}$ 均成立.

附 录 二

在磁性晶体中, 选定原点后, 原胞中磁性粒子的磁矩密度函数为 $s\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)$, $s\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)\dots$, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\dots$ 是一原胞中粒子的位置矢, 用 $\mathbf{R}_n$ 表示基本平移, 则 $s\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_n)$, $s\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_n)\dots$ 表示第 n 个原胞磁性粒子的磁矩密度函数. 表示 $V \times T^{(km)}$ 的基函数为 $s_i \varphi_i^{km}(\mathbf{r})$, s_i 为基的表示 V 很容易作出, 剩下的问题就是寻求 $\varphi_i^{km}(\mathbf{r})$ 和其表示 $T^{(km)}$ 的具体形式, 也就是寻求 $\mathbf{G}$ 群的波矢群的小表示和基函

数. 根据磁性晶体的具体晶体结构和空间群基函数性质的要求, 选取一组基函数:

$$\sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \dots \quad (\text{A7})$$

这里求和是对整个磁性晶体而言的, $\mathbf{k}$ 是波矢群 $\mathbf{G}_k$ 的波矢. 显然这组基函数反映了晶体具体结构, 有正交性和空间群基 Bloch 函数的一般性质. 若令 $\rho_1(\mathbf{r}) = \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_n)$, $\rho_2(\mathbf{r}) = \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_n) \dots$, 基函数可以简写成 $\rho_1(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, $\rho_2(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \dots$.

空间群 $\mathbf{G}$ 的波矢群 $\mathbf{G}_k$ 有元素 $g_1 = \{h_1 | \alpha_1\}$, $g_2 = \{h_2 | \alpha_2\}$, $\dots$, $g_j = \{h_j | \alpha_j\}$, 其中 $h_1, h_2, \dots, h_j$ 构成一个 j 阶点群, $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_j$ 可为非基本平移或为零. 基函数在 $\mathbf{G}_k$ 的元素作用下, 可得到所需要的小表示, 其中 $\rho_1(\mathbf{r}), \rho_2(\mathbf{r}) \dots$ 在 g 作用下相互变换, $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 在 $\mathbf{G}_k$ 群元素 $g = \{h | \alpha\}$ 作用下为 $g e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{-i\mathbf{h}\mathbf{k} \cdot \alpha} e^{i\mathbf{h}\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$.

$$\begin{aligned} g_j \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} &= D(g_j) e^{-i\mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \alpha_j} \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \\ g_i g_j \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} &= D(g_i g_j) e^{-i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot (\alpha_j + \alpha_i)} \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

其中

$$g_i \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} = D(g_i) \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) \\ \rho_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix},$$

由(A8)式可见:

(i) $\mathbf{k}$ 在布里渊区内, 即 $h_i \mathbf{k} = h_j \mathbf{k} = h_i h_j \mathbf{k} = \mathbf{k}$, (A8) 式有

$$D(g_i) e^{-i\mathbf{k} \cdot \alpha_i} \cdot D(g_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot \alpha_j} = D(g_i g_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\alpha_i + \alpha_j)}. \quad (\text{A9})$$

(ii) $\mathbf{k}$ 在布里渊区表面上, $\mathbf{k}$ 在 h_i 作用下或者不变或者为: $h_i \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_i$, $\mathbf{K}_i$ 为倒格矢, 对于简单空间群, 由于它不含非基本平移, (A9) 式成立. 对于非简单空间群, 将基函数 $\rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 扩大成 j 个基函数: $\rho_1(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{h}_1 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \rho_1(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{h}_2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \dots, \rho_1(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, 对 $\rho_2(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 同样进行扩大. 由于 $h_i(h_1, \dots, h_j)$ 和 $(h_1, \dots, h_j)$ 同样构成 $\mathbf{G}_k$ 的点群, 只是元素排列顺序不同, 故

$$g_i \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{h}_1 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ e^{i\mathbf{h}_2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \vdots \\ e^{i\mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_1 \mathbf{k} \cdot \alpha_i} \cdot e^{i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_1 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ e^{-i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_2 \mathbf{k} \cdot \alpha_i} \cdot e^{i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \vdots \\ e^{-i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \alpha_i} \cdot e^{i\mathbf{h}_i \mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{pmatrix} = T(g_i) \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{h}_1 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ e^{i\mathbf{h}_2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \vdots \\ e^{i\mathbf{h}_j \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{pmatrix}. \quad (\text{A10})$$

$$\text{且有 } [D(g_i) \times T(g_i)][D(g_j) \times T(g_j)] = [D(g_i g_j) \times T(g_i g_j)]. \quad (\text{A11})$$

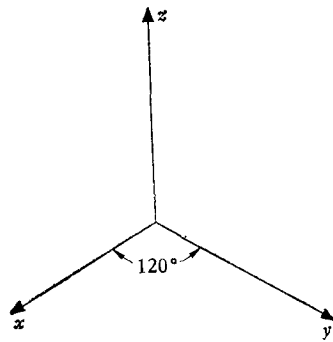


图 A1(a) 六角晶系斜坐标

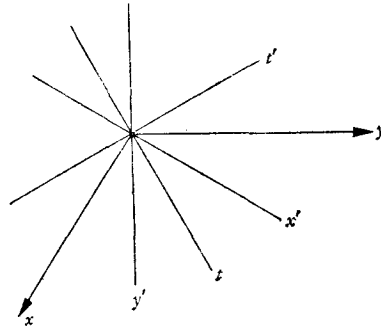


图 A1(b) 六角晶系斜坐标平面图

在实际应用时, 求出 G_k 小表示后, 只要求出 G 的生成元表示就够用了. 注意, 这里给出的小表示一般是可约的.

将以上述方法应用到我们研究的镧系金属, D_{6h}^4 有平移子群 $\{E|R_n\}$ 和元素 $E, C_6^2, C_6^4, \sigma_{I'}, \sigma_{y'}, \sigma_{x'}, I, S_{(5\pi/3)}, S_{(\pi/3)}, C_{2I}, C_{2y}, C_{2x}, \{C_6^3|\frac{1}{2}a_3\}, \{C_6^5|\frac{1}{2}a_3\}, \{C_6|\frac{1}{2}a_3\}, \{\sigma_I|\frac{1}{2}a_3\}, \{\sigma_y|\frac{1}{2}a_3\}, \{\sigma_x|\frac{1}{2}a_3\}, \{\sigma_h|\frac{1}{2}a_3\}, \{S_{(2\pi/3)}|\frac{1}{2}a_3\}, \{S_{(4\pi/3)}|\frac{1}{2}a_3\}, \{C_{2I'}|\frac{1}{2}a_3\}, \{C_{2y'}|\frac{1}{2}a_3\}, \{C_{2x'}|\frac{1}{2}a_3\}$, 其中 $x, x', y, y', z, z' \dots$ 见图 A1. 依次 24 个元素记 1 到 6 的任一元素为 H_{1-6} , 其余类推. 对于波矢群 $\hat{C}_{6v}$, 星 $\{k\}$ 为 $(0, 0, k_z), (0, 0, -k_z)$. 将 $\hat{C}_{6v}$ 的元素作用到基 $\rho_1(r)e^{ik_z z}, \rho_2(r)e^{ik_z z}$ 上, $\rho_1(r), \rho_2(r)$ 分别表示镧系金属原胞中 A_1, A_2 位置粒子的密度函数, 这样得到两个小表示和相应的基函数.

$\hat{C}_{6v}$	H_{1-6}	H_{13-18}	基
M_1	1	$e^{-i\frac{1}{2}k_z a_3}$	$\frac{1}{2}(\rho_1(r) + \rho_2(r))e^{ik_z z}$
M_2	1	$-e^{-i\frac{1}{2}k_z a_3}$	$\frac{1}{2i}(\rho_1(r) - \rho_2(r))e^{ik_z z}$

再求 D_{6h} 的轴矢量表示, 引入基为 $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(s_x + is_y) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(s_x - is_y) \end{pmatrix}$, 得到的表示用下列两个矩阵表示:

$$N_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad N_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-2i\varphi} \\ 0 & -e^{2i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (A12)$$

$H_{1-3}, H_{7-9}, H_{13-15}, H_{19-21}$ 表示为 N_1 形式, $H_{4-6}, H_{10-12}, H_{16-18}, H_{19-21}$ 表示为 N_2 形式, (A12) 式中的 φ 角列表如下:

元 素	E	C_6^2	C_6^4	$\sigma_{I'}$	$\sigma_{y'}$	$\sigma_{x'}$	I	$S_{(5\pi/3)}$	$S_{(\pi/3)}$
φ	0	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi}{6}$	$-\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{2}$	0	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$
元 素	C_{2I}	C_{2y}	C_{2x}	C_6^3	C_6^5	C_6	σ_I	σ_y	σ_x
φ	$\frac{\pi}{6}$	$-\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	0
元 素	σ_h	$S_{(2\pi/3)}$	$S_{(4\pi/3)}$	$C_{2I'}$	$C_{2y'}$	$C_{2x'}$			
φ	π	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	0			

由于 $s_1(r)e^{ik_z z}, s_2(r)e^{ik_z z}$ 只是 z 的函数和 r 的 δ 函数, 所以用直角坐标计算是方便的.

将 $\hat{C}_{6v}$ 的表示 $T_{V_{\mathbf{r}}}$ 可以约化成四个不可约小表示. 列表如下:

$V \times \hat{C}_{6v}$	H_{1-3}	H_{4-6}	H_{13-15}	H_{16-18}	基 函 数
M_1	1	-1	$e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$-e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\frac{1}{2}e^{ik_zz}(s_{1z}(r) + s_{2z}(r))$
M_2	1	-1	$-e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\frac{1}{2i}e^{ik_zz}(s_{1z}(r) - s_{2z}(r))$
M_3	$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i2\varphi} \\ -e^{i2\varphi} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i2\varphi} \\ -e^{i2\varphi} & 0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}}e^{ik_zz} \begin{pmatrix} s_{1x}(r) + s_{2x}(r) + i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r)) \\ s_{1x}(r) + s_{2x}(r) - i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r)) \end{pmatrix}$
M_4	$\begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i2\varphi} \\ -e^{i2\varphi} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & -e^{-i\varphi} \end{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\begin{pmatrix} 0 & e^{-i2\varphi} \\ e^{i2\varphi} & 0 \end{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}k_2a_3}$	$\frac{1}{i2\sqrt{2}}e^{ik_zz} \begin{pmatrix} s_{1x}(r) - s_{2x}(r) + i(s_{1y}(r) - s_{2y}(r)) \\ s_{1x}(r) - s_{2x}(r) - i(s_{1y}(r) - s_{2y}(r)) \end{pmatrix}$

由 D_{6h}^4 的元素关系 $IH_{1-6} = H_{7-12}$; $IH_{13-18} = H_{19-24}$, 就可得到相应的空间群表示 T_{M_1} , T_{M_2} , T_{M_3} , T_{M_4} , 其中 T_{M_1} 对应的基函数为

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ik_z z} (s_{1z}(r) + s_{2z}(r)) \\ e^{-ik_z z} (s_{1z}(r) + s_{2z}(r)) \end{pmatrix}, \quad (A13)$$

T_{M_3} 对应的基函数为

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ik_z z} [(s_{1x}(r) + s_{2x}(r)) + i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r))] \\ e^{ik_z z} [(s_{1x}(r) + s_{2x}(r)) - i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r))] \\ e^{-ik_z z} [(s_{1x}(r) + s_{2x}(r)) + i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r))] \\ e^{-ik_z z} [(s_{1x}(r) + s_{2x}(r)) - i(s_{1y}(r) + s_{2y}(r))] \end{pmatrix}. \quad (A14)$$

得到 T_{M_3} 的表示为

$$\begin{aligned} H_{1-3} &\rightarrow \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, & H_{4-6} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -e^{-2i\varphi} & 0 & 0 \\ -e^{2i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{-2i\varphi} \\ 0 & 0 & -e^{2i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \\ H_{7-9} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} & 0 & 0 \end{pmatrix}, & H_{10-12} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -e^{-2i\varphi} \\ 0 & 0 & -e^{2i\varphi} & 0 \\ 0 & -e^{-2i\varphi} & 0 & 0 \\ -e^{2i\varphi} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ H_{13-15} &\rightarrow \begin{pmatrix} e^{i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} \end{pmatrix}, & H_{16-18} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -e^{-2i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 \\ -e^{2i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{-2i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} \\ 0 & 0 & -e^{2i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 \end{pmatrix}, \\ H_{19-21} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & e^{i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} \\ e^{i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 \end{pmatrix}, & H_{22-24} &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -e^{-2i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} \\ 0 & 0 & -e^{2i\varphi + \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 \\ 0 & -e^{-2i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 \\ -e^{2i\varphi - \frac{1}{2}ik_z a_3} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

另外, z 向量表示为 $H_{1-6} \rightarrow 1$, $H_{7-12} \rightarrow -1$, $H_{13-18} \rightarrow 1$, $H_{19-24} \rightarrow -1$.

由 $\{T_{M_3} \times T_{M_3}\}$ 并约化它, 可以得到不变量

$$A(z - z') [\phi_1(r)\phi_4(r') - \phi_4(r)\phi_1(r') + \phi_2(r)\phi_3(r') - \phi_3(r)\phi_2(r')]. \quad (A15)$$

(A15) 式中 $A(z - z')$ 具有 z 向量的对称性, 对应于 (A15) 式的含微商不变量为

$$\phi_1 \frac{\partial \phi_4}{\partial z} - \phi_4 \frac{\partial \phi_1}{\partial z} + \phi_2 \frac{\partial \phi_3}{\partial z} - \phi_3 \frac{\partial \phi_2}{\partial z}. \quad (A16)$$

(A15), (A16) 式中 ϕ 与 ϕ 是相同形式的基函数 (A14) 式, 为了明显起见给它们以不同的标号.

又由 $T_{M_3} \times T_{M_3}^*$ 约化后得到相应的不变量,

$$\phi_1 \phi_1^* + \phi_2 \phi_2^* + \phi_3 \phi_3^* + \phi_4 \phi_4^*, \quad (A17a)$$

$$(\phi_1 \phi_1^* + \phi_2 \phi_2^* + \phi_3 \phi_3^* + \phi_4 \phi_4^*)^2, \quad (A17b)$$

$$\phi_1 \phi_1^* \phi_2 \phi_2^* + \phi_3 \phi_3^* \phi_4 \phi_4^*, \quad \phi_1 \phi_1^* \phi_3 \phi_3^* + \phi_2 \phi_2^* \phi_4 \phi_4^*, \quad \phi_1 \phi_1^* \phi_4 \phi_4^* + \phi_2 \phi_2^* \phi_3 \phi_3^*. \quad (A17c)$$

又由 $(T_{M_3} \times T_{M_3} \times \cdots \times T_{M_3})$ 共 n 个 T_{M_3} 直乘, 约化后可得到不变量

$$\phi_1^n + \phi_2^n + \phi_3^n + \phi_4^n. \quad (\text{A18})$$

(A18) 式中 n 为偶数, 并有 $n\varphi = 2\pi n'$, $\frac{1}{2}nk_{0z}a_3 = 2\pi n''$, n' 与 n'' 是满足这两个关系的最小整数。同时有 $e^{in k_{0z} \cdot z} = 1$, k_{0z} 为临界波矢。

同上, 可以作出 T_{M_1} 的表示, 由 $\{T_{M_1} \times T_{M_1}\}$ 并约化它可以得到不变量,

$$A(z - z')[\phi_1(\mathbf{r})\phi_2(\mathbf{r}') - \phi_2(\mathbf{r})\phi_1(\mathbf{r}')]. \quad (\text{A19})$$

(A19) 式中 $A(z - z')$ 具有 z 向量的对称性, 对应于 (A19) 式的含微商不变量为

$$\phi_1 \frac{\partial \phi_2}{\partial z} - \phi_2 \frac{\partial \phi_1}{\partial z}. \quad (\text{A20})$$

其他对应于 T_{M_1} 的不变量同样可作出。

在本文工作过程中, 作者经常得到郝柏林、蒲富恪、于渌等同志有益的讨论和帮助, 得到李荫远教授的关心和帮助, 特此谢忱。

参 考 文 献

- [1] E. M. Лифшиц, ЖЭТФ, **11** (1941), 255, 269.
- [2] L. D. Landau, and E. M. Lifshitz, Statistical Physics (1968). Л. Д. 朗道, Е. М. 栗弗席兹, 统计物理, 杨训恺等译 (1964).
- [3] G. Ya. Lyubarskii, The Application of Group Theory in Physics (1960).
- [4] A. Michelson, Phys. Rev., **B12**(1975), 1071.
- [5] О. В. Ковалев, ФТТ, **5** (1963), 3157.
- [6] A. P. Cranecknell, Magnetism in Crystalline Materials (1975).
- [7] J. E. Goldrich and J. L. Birman, Phys. Rev., **167**(1968), 528.
- [8] J. O. Dimmoch, Phys. Rev., **130**(1963), 1337.
- [9] И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ, **46** (1964), 1420; **47** (1964), 336.
- [10] P. G. de Gennes, The Physics of Liquid Crystals (1974), pp. 11, 67, 239.
- [11] 沈觉涟, 物理学报, **22** (1966), 94.
- [12] 芳里奎, 日本物理学会志, **17** (1962), No. 1, 2.
- [13] К. П. Белов, УФН, **82** (1964), 449.
- [14] R. J. Elliott, Magnetic Properties of Rare Earth Metals (1972), pp. 172—182.
- [15] R. L. Melcher, Phys. Rev. Lett., **30**(1973), 125.
- [16] M. Morse, Calculus of Variations in the Large (1934).

ON THE THEORY OF SECOND ORDER PHASE TRANSITION AND AN EXPOSITION ON THE NON-VALIDITY OF LIFSHITZ CONDITION

SHEN JUE-LIAN

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

We assume that the free energy of the system is a functional of order parameter. In the vicinity of second order transition, the free energy density can be expanded as a power series of order parameter as well as its correlation term. Following the procedure given here, for both local and non-local, the order parameter representing equilibrium configuration can be found from the vanishment of the first variation of free energy. In order to find out the solution, it is necessary to carry out Fourier transform for order parameter, and this is identical to expand the order parameter in terms of the base functions of symmetric group of the system. In this way, we analyse the change of symmetry in second order transition.

By making use the necessary and sufficient condition (or sufficient condition) for extrema in the variational procedure, the condition of stability for states in second order transition is discussed. Because the correlation term has not been neglected in the procedure of finding extrema, so that the restrictions condition of Lifshitz on symmetry changing does not come into being. It should be pointed out that, in Lifshitz approach the correlation term is neglected in obtaining the minimum of free energy functional, whereas it is included in discussing the problem of stability. Therefore, Lifshitz's approach is inconsistent in itself. Furthermore, there exists certain kinds of system (such as one component axial vector system), in which the correlation term that leads to the Lifshitz condition cannot be constructed from order parameter. Nevertheless, Lifshitz and others also put restrictions on such system. This is obviously unreasonable. By making use the general theoretical approach described above, we explain the experimental results of phase transition in heavy lanthanide metals at Néel point. It serves as an example to show that there are second order phase transition phenomena for which Lifshitz's approach fails to explain.