

Частотные характеристики на рис. 4 и 5 с включением на подстанции КБ (действующая схема) свидетельствует о резонансном усилении 5-й гармоники токов и напряжений вследствие появления полюса ЧХ на резонансной частоте.

Очевидно, что с включением КБ в качестве КУ имеет место усиление 3-й гармоники тока в 2,32 раза, 5-й гармоники тока – в 5,93 раза, а потери активной мощности на этих частотах превышают потери на основной частоте в 5,39 и 35,15 раза соответственно.

Суммарные потери от протекания токов всех гармоник в сети возрастают в 44,31 раза и практически равны величине активных потерь на основной частоте.

Рекомендуемое к установке ФКУ, как видно на рис. 4 и 5, позволяет практически полностью исключить протекание в сети токов 3, 5, 7, 9-й гармоник и существенно снизить величины гармоник более высокого порядка. Несмотря на некоторое увеличение гармоник высокого порядка по сравнению с вариантом установки КБ в качестве КУ, суммарные потери активной мощности от протекания токов высших гармоник возрастают только в 3,92 раза и не превышают значений, нормируемых ГОСТ 13109–97, что свидетельствует о существенно более высокой эффективности применения ФКУ в качестве КУ при той же генерируемой реактивной мощности.

Библиографические ссылки

1. Глушаков С. В., Жакин И. А., Хачиров Т. С. Математическое моделирование: Учебный курс. М.: АСТ, 2001.

2. Жежеленко И. В., Саенко Ю. Л. Показатели качества электроэнергии и их контроль на промышленных предприятиях. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 2000.

3. Иванов В. С. Метод расчета несинусоидальности напряжения и исследование резонансных явлений на высших гармониках в сети внутрезаводского электроснабжения при работе вентельных преобразователей: автореферат. М.: МЭИ, 1978.

4. Маркман Г. З. Энергоэффективность преобразования и транспортировки электрической энергии. Томск: Изд-во Том. политехн. ун-та, 2008.

5. Минина А. А., Платонова Е. В. Исследование несинусоидальности напряжения на тяговых подстанциях переменного тока // Современные техника и технологии: сб. тр. XVI Междунар. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. В 3 т. Т. 1. Томск: Изд-во Томского политехнич. ун-та, 2010.

6. Минина А. А., Пантелеев В. И. Обеспечение электромагнитной совместимости при компенсации реактивной мощности на тяговых подстанциях переменного тока // Всерос. конкурс науч. работ студентов, магистрантов и аспирантов «Компьютерные технологии и информационные системы в электротехнике»: сб. материалов / отв. за вып. А. А. Северин, М. Н. Третьякова (Тольятти, 29 нояб. 2011 г.). Тольятти: Изд-во ТГУ, 2011.

© Минина А. А., Пантелеев В. И.,
Платонова Е. В., 2013

УДК 537.612

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР ТВЕРДОГО РАСТВОРА $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$

И. И. Назаренко, С. Н. Софронова

Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева
Россия, Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31. E-mail: ilnz007@live.ru

Проведен симметричный анализ возможных магнитных структур кристалла $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$, возникающих в результате фазовых переходов. Получены базисные функции неприводимых представлений, входящих в магнитное представление этой структуры, показывающие вероятные направления магнитных моментов атомов $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$. Полученные результаты помогут интерпретации экспериментальных данных при установлении истинной магнитной структуры и механизмов магнитных переходов в исследуемом соединении.

Ключевые слова: магнетизм, теоретико-групповой анализ, людвициты.

GROUP-THEORETICAL ANALYSIS OF $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$ POTENTIAL MAGNETIC STRUCTURES

I. I. Nazarenko, S. N. Sofronova

Siberian State Aerospace University named after academician M. F. Reshetnev
31 "Krasnoyarskiy rabochiy" prospect, Krasnoyarsk, Russia. E-mail: ilnz007@live.ru

The work presents a group-theoretical analysis which makes possible to determine $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$ crystal potential magnetic structures. The obtained information will help to analyze and interpret experimental data, while determining the true magnetic structure and the mechanisms of magnetic transitions in the compound being tested.

Keywords: magnetism, group-theoretical, ludwigites.

В Институте физике имени Л. В. Киренского СО РАН были выращены и активно исследуются кристаллы $\text{Ni}_5\text{GeO}_4(\text{BO}_3)_2$. Для понимания природы и механизмов фазовых переходов в этом соединении необходимо установить магнитную структуру в низкотемпературной фазе, что прямыми экспериментальными методами возможно лишь в нескольких научных центрах в мире. Симметричный анализ в совокупности с экспериментальными исследованиями намагниченности и других магнитных свойств позволяет предположить магнитную структуру исследуемого соединения.

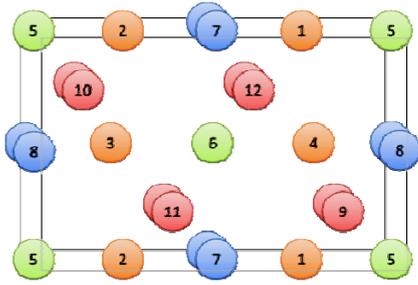


Рис. 1. Магнитные ионы в элементарной ячейке кристалла $\text{Ni}_5\text{Ge}(\text{O}_2\text{BO}_3)_2$

Кристаллы $\text{Ni}_5\text{GeO}_4(\text{BO}_3)_2$ принадлежат к семейству людивитов. Кристаллическая структура исследуемого соединения относится к пространственной группе $R\bar{3}m$ (№ 55). Элементарная ячейка содержит 10 магнитных атомов, которые расположены в симметричных позициях $4h$ (1–4 на рис. 1), $2b$ (5, 6 на рис. 1), $2c$ (7, 8 на рис. 1), $4g$ (9–12 на рис. 1). Интересной особенностью данного соединения является то, что часть ионов Ni (ион с магнитным моментом) и Ge (немагнитный ион) статистически разупорядочены в симметричной позиции $4g$ и занимают ее равной вероятностью (1/2). Вследствие этого при проведении симметричного анализа для этого случая мы будем считать, что в позиции $4g$ находится «усредненный» магнитный ион. Однако поскольку в реальном кристалле в малых локальных областях могут встречаться различные способы упорядочения ионов никеля и германия в позиции $4g$, мы рассмотрим несколько кристаллических структур, в которых ионы никеля и германия занимают определенные положения в позиции $4g$, т. е. упорядочены. В этом случае из двенадцати приведенных на рис. 1 положений магнитными ионами будут заняты только десять, причем два из них в позиции $4g$ (положения 9–12). В рамках одной элементарной ячейки существует всего три различных варианта упорядочения ионов никеля и германия, для каждого из них проведен симметричный анализ возможных магнитных структур. Кроме этого, мы приводим результаты симметричного анализа для удвоенной вдоль оси с элементарной ячейки, в этом случае различных вариантов упорядочения ионов никеля и германия гораздо больше, но мы, из-за ограниченного объема статьи, приводим лишь два наиболее интересных случая. Во всех случаях мы будем проводить

симметричный анализ для $k = 0$ (центр зоны Бриллюэна), то есть для случая, когда магнитная ячейка совпадает с кристаллографической ячейкой.

Симметричный анализ. Первым шагом при проведении симметричного анализа является построение магнитного представления для какой-либо звезды волновых векторов k и разложения этого представления на неприводимые представления [1, с. 154]:

$$d^k = \sum_{\nu} n^{\nu} \tau^{k\nu},$$

где $\tau^{k\nu}$ – неприводимое представление; n^{ν} – кратность вхождения ν -го неприводимого представления в приводимое, которая определяется по формуле

$$n^{\nu} = \frac{1}{n(G_k^0)} \sum_{h \in G_k^0} \chi^k(g) \chi^{*k\nu}(g),$$

где $n(G_k^0)$ – число элементов симметрии точечной группы волнового вектора G_k^0 . Характер магнитного представления определяется по правилу

$$\chi^k(g) = \delta_h Sp R^h \sum_j \exp[-ika_p(g, j)] \delta_{j, gj},$$

где элементы симметрии h взяты из [2, с. 312], действуют на векторы в трехмерном пространстве и представлены в виде трехмерных матриц R^h , $\delta_h = 1$, если h – обычный поворот, и $\delta_h = -1$, если h – инверсионный поворот; $a_p(g, j)$ – вектор возвращающей трансляции, символически определяемый формулой $g(0, i) = (a_p, j)$, т. е. вектор, который переводит атом j в атом i того же сорта нулевой ячейки; gj – формальная запись того номера атома, в который переходит атом номера j под действием элемента $g \in G_k$; $\delta_{j, gj}$ – символ Кронекера. $\chi^{k\nu}$ – характер неприводимого представления $\tau^{k\nu}$.

Базисные функции неприводимых представлений можно определить по формуле

$$e_{\lambda}^i(k\nu) = \sum_{h \in G_k^0} \tau_{\lambda[\mu]}^{*k\nu}(g) \exp[-ika_p(g, j)] \delta_{j, g[j]} R_{[\beta]}^h,$$

где $\tau_{\lambda[\mu]}^{k\nu}(g)$ – матричный элемент матрицы неприводимого представления $\tau^{k\nu}$, соответствующей элементу $g \in G_k$ группы волнового вектора k . Запись $R_{[\beta]}^h$ означает, что в формуле взят β столбец матрицы R^h . Суммирование в формуле проходит только по тем элементам $g = (h|\alpha)$, у которых h принадлежит кристаллическому классу G_k^0 группы волнового вектора G_k . Индексы μ, j, β в формуле, заключенные в квадратные скобки, должны фиксироваться. Эти индексы определяют старт при построении базисных функций. Изменение старта приводит либо к новой системе базисных функций, либо к нулю. Если непри-

водимое представление входит в состав магнитного представления несколько раз, то каждому такому вхождению соответствует свой базис. Поскольку магнитные моменты, образующие магнитную структуру, вещественны, базисные функции также должны быть получены в виде вещественных величин.

Анализ возможных магнитных структур неупорядоченного $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$. Как уже отмечалось выше в случае, когда ионы никеля и германия равномерно распределены в симметричной позиции 4g, кристаллическая структура принадлежит к пространственной группе Pbam (№ 55). Разложение приводимого магнитного представления на неприводимые для ($k = 0$) для каждой симметричной позиции следующее:

$$d^{(k=0)}(4h) = 2\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4 + \tau_5 + 2\tau_6 + 2\tau_7 + \tau_8,$$

$$d^{(k=0)}(2b) = \tau_2 + 2\tau_4 + 2\tau_6 + \tau_8,$$

$$d^{(k=0)}(2c) = \tau_2 + 2\tau_4 + 2\tau_6 + \tau_8,$$

$$d^{(k=0)}(4g) = 2\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4 + \tau_5 + 2\tau_6 + 2\tau_7 + \tau_8.$$

Далее были построены базисные векторы (табл. 1), которые задают направления магнитных моментов на ионах. Оси x, y, z совпадают с кристаллографическими направлениями a, b и c пространственной группы Pbam (№ 55). Здесь и во всех последующих таблицах мы будем использовать именно эти обозначения, даже когда из удобства для некоторых случаев мы будем делать преобразование системы координат. Кроме того, мы предполагаем, что фазовый переход из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченное состояние происходит одновременно во всей системе магнитных ионов. Несмотря на то что наше предположение не подтверждено экспериментальными данными, кристаллическая структура исследуемого соединения такова, что все магнитные ионы достаточно сильно связаны между собой обменными взаимодействиями и вероятнее всего переход в магнитоупорядоченное состояние будет происходить одновременно во всей системе магнитных ионов. В этом случае, исходя из концепции фазовых переходов по одному неприводимому представлению [3], можно ограничиться рассмотрением только тех неприводимых пред-

ставлений, которые входят в разложение для всех симметричных позиций. В данном случае это четыре неприводимых представления τ_2, τ_4, τ_6 и τ_8 . Неприводимым представлениям τ_2 и τ_8 соответствует легкоосная магнитная структура с антиферромагнитным и ферромагнитным упорядочением соответственно. Неприводимым представлениям τ_4 и τ_6 соответствует легкоплоскостная магнитная структура, причем в данном случае для обоих представлений базисные векторы являются линейной комбинацией двух векторов, один из которых соответствует случаю антиферромагнитного упорядочения, а второй – случаю ферромагнитного упорядочения.

Анализ возможных магнитных структур для различных случаев упорядочения ионов Ni и Ge в кристалле $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$.

P2₁am (№ 26). Рассмотрим упорядочение в рамках одной элементарной ячейки. Предположим что ионы 9, 12 являются магнитными (Ni), а 10 и 11 – немагнитными (Ge) (рис. 2). В данном случае кристаллическая структура принадлежит к пространственной группе P2₁am (№ 26) [4, p. 911]. Для выполнения расчетов удобнее выбрать другую систему координат. Переход от старой системы координат, соответствующей пространственной группе Pbam (№ 55), к новой осуществлен по следующему правилу:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}.$$

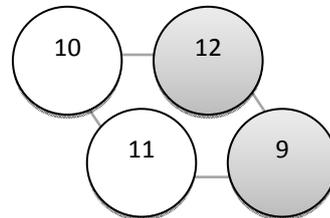


Рис. 2. Упорядочение магнитных ионов в позиции 4g группы № 55

Таблица 1

Направления магнитных моментов для случая неупорядоченного $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$

τ	Направления магнитных моментов на ионах
1	$e^1_x - e^2_x - e^3_x + e^4_x + e^9_x - e^{10}_x - e^{11}_x + e^{12}_x$ $e^1_y - e^2_y + e^3_y - e^4_y + e^9_y - e^{10}_y + e^{11}_y - e^{12}_y$
2	$e^1_z + e^2_z - e^3_z - e^4_z + e^9_z - e^{10}_z + e^{11}_z - e^{12}_z$ $e^1_z + e^2_z - e^3_z - e^4_z + e^9_z - e^{10}_z + e^{11}_z - e^{12}_z$
3	$e^1_x + e^2_x + e^3_x + e^4_x + e^9_x + e^{10}_x + e^{11}_x + e^{12}_x$ $e^1_y + e^2_y - e^3_y - e^4_y + e^9_y - e^{10}_y + e^{11}_y - e^{12}_y$
4	$e^1_x + e^2_x + e^3_x + e^4_x + e^9_x + e^{10}_x + e^{11}_x + e^{12}_x$ $e^1_y + e^2_y - e^3_y - e^4_y + e^9_y - e^{10}_y + e^{11}_y - e^{12}_y$
5	$e^1_z - e^2_z - e^3_z + e^4_z + e^9_z - e^{10}_z - e^{11}_z + e^{12}_z$ $e^1_z - e^2_z - e^3_z + e^4_z + e^9_z - e^{10}_z - e^{11}_z + e^{12}_z$
6	$e^1_x + e^2_x - e^3_x - e^4_x + e^9_x - e^{10}_x + e^{11}_x - e^{12}_x$ $e^1_y + e^2_y + e^3_y + e^4_y + e^9_y + e^{10}_y + e^{11}_y + e^{12}_y$
7	$e^1_x - e^2_x + e^3_x - e^4_x + e^9_x - e^{10}_x + e^{11}_x - e^{12}_x$ $e^1_y - e^2_y - e^3_y + e^4_y + e^9_y - e^{10}_y - e^{11}_y + e^{12}_y$
8	$e^1_z + e^2_z + e^3_z + e^4_z + e^9_z + e^{10}_z + e^{11}_z + e^{12}_z$ $e^1_z + e^2_z + e^3_z + e^4_z + e^9_z + e^{10}_z + e^{11}_z + e^{12}_z$

Возможные магнитные структуры для упорядоченного $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$ (пространственная группа $P2_1am$ (№ 26))

τ	Направления магнитных моментов на ионах
1	$e^1_z - e^2_z + e^3_z - e^4_z + e^5_z - e^6_z + e^7_z - e^8_z + e^9_z - e^{12}_z$
2	$e^1_x + e^2_x + e^3_x + e^4_x + e^5_x + e^6_x + e^7_x + e^8_x + e^9_x + e^{12}_x$; $e^1_y - e^2_y + e^3_y - e^4_y + e^5_y - e^6_y + e^7_y - e^8_y + e^9_y - e^{12}_y$
3	$e^1_z + e^2_z + e^3_z + e^4_z + e^5_z + e^6_z + e^7_z + e^8_z + e^9_z + e^{12}_z$
4	$e^1_x - e^2_x + e^3_x - e^4_x + e^5_x - e^6_x + e^7_x - e^8_x + e^9_x - e^{12}_x$; $e^1_y + e^2_y + e^3_y + e^4_y + e^5_y + e^6_y + e^7_y + e^8_y + e^9_y + e^{12}_y$

Для данного случая также было построено магнитное представление и проведено разложение по неприводимым представлениям для каждой симметричной позиции для волнового вектора $k = 0$:

$$d_M^{(k=0)}(2b_1) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2b_2) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2b_3) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2a_1) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2a_2) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4.$$

В табл. 2 приведены базисные векторы, которые задают направления магнитных моментов на ионах. Как видно из таблицы, магнитные структуры для неприводимых представлений τ_1, τ_2, τ_4 и τ_3 подобны магнитным структурам для неприводимых представлений τ_2, τ_4, τ_6 и τ_8 для случая неупорядоченного кристалла, соответственно.

$P112/m$ (№ 10). Еще одним вариантом упорядочения в рамках одной элементарной ячейки будет являться следующее упорядочение: ионы Ni расположены в положении 9 и 10, ионы Ge в положении 11 и 12 (рис. 3). В данном случае пространственная группа симметрии – $P112/m$ (№ 10) [4]. В этом случае нет необходимости переходить в другую систему координат, поэтому все расчеты проведены в системе координат, соответствующей пространственной группе $Pbam$ (№ 55). Разложение по неприводимым представлениям для каждой симметричной позиции для волнового вектора $k = 0$ имеет вид

$$d_M^{(k=0)}(2n_1) = \tau_1 + 2\tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2n_2) = \tau_1 + 2\tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(1b) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1h) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1d) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1c) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(2m) = \tau_1 + 2\tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4.$$

Базисные векторы, которые задают направления магнитных моментов на ионах, приведены в табл. 3. Как видно из таблицы, обоим представлениям (τ_1 и τ_3),

которые входят в разложение для каждой симметричной позиции, соответствует ферромагнитное упорядочение: либо вдоль оси c (неприводимое представление τ_1), либо в плоскости ab (неприводимое представление τ_3). Следовательно, если фазовый переход происходит одновременно во всей системе магнитных ионов, то переход из парамагнитного состояния возможен только в ферромагнитное состояние.

$Pb2_1m$ (№ 26). Последний вариант упорядочения в рамках одной элементарной ячейки, когда магнитные ионы Ni занимают положения 9 и 11 (рис. 4), пространственная группа симметрии в этом случае $Pb2_1m$ (№ 26). В данном случае, как и в предыдущем, также нет необходимости переходить в другую систему координат.

Разложение по неприводимым представлениям для каждой симметричной позиции для волнового вектора $k = 0$ следующее:

$$d_M^{(k=0)}(2b_1) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2b_2) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2b_3) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2a_1) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2a_2) = \tau_1 + 2\tau_2 + \tau_3 + 2\tau_4.$$

Базисные векторы приведены в табл. 4. Как видно из таблицы, базисные векторы для такого типа упорядочения подобны базисным векторам для упорядоченной изображенной на рис. 2.

Анализ возможных магнитных структур для удвоенной вдоль оси c магнитной ячейки кристалла $Ni_5GeO_4(BO_3)_2$. Так как упорядочение магнитных ионов может в значительной степени влиять на магнитную структуру кристалла, было выполнено рас-

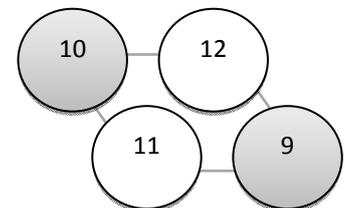


Рис. 3. Ионы 9 и 10 – Ni (позиция 4g в группе № 55)

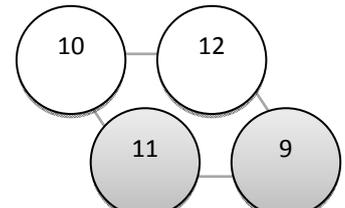


Рис. 4. Ионы 9 и 11 – Ni (позиция 4g в группе № 55)

смотрение различных вариантов упорядочения ионов Ni и Ge для удвоенной элементарной ячейки (вдоль кристаллографической оси *c*). В результате удвоения изменяется пространственная группа симметрии с Pbam (№ 55) на Pnnm (№ 58) [4].

P112/m (№ 10). Если магнитные ионы Ni упорядочить таким образом, как показано на рис. 6 (в положениях 9, 10, 23, 24), то пространственная группа симметрии становится P112/m (№ 10) [4]. Для выполнения расчетов удобнее выбрать другую систему координат. Переход от старой системы координат, соответствующей пространственной группе Pbam (№ 55), к новой осуществляется по следующему правилу:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}.$$

Для данного варианта упорядочения так же было получено разложение по неприводимым представлениям для волнового вектора $k = 0$ для каждой симметричной позиции:

$$d_M^{(k=0)}(4o_1) = 3\tau_1 + 3\tau_2 + 3\tau_3 + 3\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(4o_2) = 3\tau_1 + 3\tau_2 + 3\tau_3 + 3\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2m) = \tau_1 + 2\tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2n) = \tau_1 + 2\tau_2 + 2\tau_3 + \tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2i) = \tau_1 + \tau_2 + 2\tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(2l) = \tau_1 + \tau_2 + 2\tau_3 + 2\tau_4,$$

$$d_M^{(k=0)}(1d) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1f) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1c) = \tau_1 + 2\tau_3,$$

$$d_M^{(k=0)}(1e) = \tau_1 + 2\tau_3.$$

Базисные вектора, соответствующие каждому неприводимому представлению, представлены в табл. 6. В данном случае два представления (τ_1 и τ_3) входят в разложение для каждой симметричной позиции. Базисные векторы неприводимых представлений τ_1 и τ_3 составлены из векторов, соответствующих как случаю ферромагнитного упорядочения, так и случаю антиферромагнитного упорядочения. Кроме этого можно отметить тот факт, что для различных симметричных позиций базисный вектор может быть представлен линейной комбинацией двух, трех векторов.

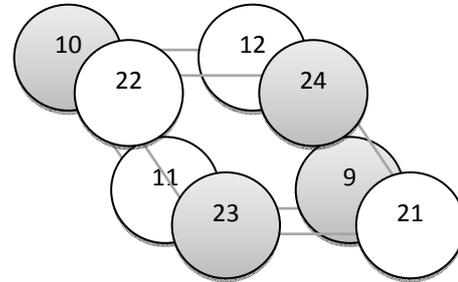


Рис. 6. Упорядочение магнитных ионов Ni, соответствующее группе P112/m

Таблица 3

Возможные магнитные структуры для упорядоченного Ni₅GeO₄(BO₃)₂ (пространственная группа P112/m (№ 10))

τ	Направления магнитных моментов на ионах
1	$e_z^1 + e_z^2 + e_z^3 + e_z^4 + e_z^5 + e_z^6 + e_z^7 + e_z^8 + e_z^9 + e_z^{10}$
2	$e_x^1 - e_x^2 + e_x^3 - e_x^4 + e_x^5 - e_x^6 + e_x^7 - e_x^8 + e_x^9 - e_x^{10};$ $e_y^1 - e_y^2 + e_y^3 - e_y^4 + e_y^5 - e_y^6 + e_y^7 - e_y^8 + e_y^9 - e_y^{10}$
3	$e_x^1 + e_x^2 + e_x^3 + e_x^4 + e_x^5 + e_x^6 + e_x^7 + e_x^8 + e_x^9 + e_x^{10};$ $e_y^1 + e_y^2 + e_y^3 + e_y^4 + e_y^5 + e_y^6 + e_y^7 + e_y^8 + e_y^9 + e_y^{10}$
4	$e_z^1 - e_z^2 + e_z^3 - e_z^4 + e_z^5 - e_z^6 + e_z^7 - e_z^8 + e_z^9 - e_z^{10}$

Таблица 4

Возможные магнитные структуры для упорядоченного Ni₅GeO₄(BO₃)₂ (пространственная группа P2₁am (№26))

τ	Направления магнитных моментов на ионах
1	$e_z^1 - e_z^2 + e_z^3 - e_z^4 + e_z^5 - e_z^6 + e_z^7 - e_z^8 + e_z^9 - e_z^{11}$
2	$e_x^1 - e_x^2 + e_x^3 - e_x^4 + e_x^5 - e_x^6 + e_x^7 - e_x^8 + e_x^9 - e_x^{11};$ $e_y^1 + e_y^2 + e_y^3 + e_y^4 + e_y^5 + e_y^6 + e_y^7 + e_y^8 + e_y^9 + e_y^{11}$
3	$e_z^1 + e_z^2 + e_z^3 + e_z^4 + e_z^5 + e_z^6 + e_z^7 + e_z^8 + e_z^9 + e_z^{11}$
4	$e_x^1 + e_x^2 + e_x^3 + e_x^4 + e_x^5 + e_x^6 + e_x^7 + e_x^8 + e_x^9 + e_x^{11};$ $e_y^1 - e_y^2 + e_y^3 - e_y^4 + e_y^5 - e_y^6 + e_y^7 - e_y^8 + e_y^9 - e_y^{11}$

Возможные магнитные структуры для упорядоченного Ni₅GeO₄(BO₃)₂ (пространственная группа Pn2₁m (№ 31))

τ	Направления магнитных моментов на ионах
1	$e^1_x + e^2_x - e^3_x - e^4_x + e^5_x - e^6_x - e^{13}_x - e^{14}_x + e^{15}_x + e^{16}_x - e^{17}_x + e^{18}_x$; $e^1_y + e^2_y + e^3_y + e^4_y + e^5_y + e^6_y - e^{13}_y - e^{14}_y - e^{15}_y - e^{16}_y - e^{17}_y - e^{18}_y$; $e^1_z + e^2_z - e^3_z - e^4_z + e^5_z - e^6_z + e^7_z + e^8_z + e^9_z - e^{12}_z + e^{13}_z + e^{14}_z - e^{15}_z - e^{16}_z + e^{17}_z - e^{18}_z - e^{19}_z - e^{20}_z + e^{22}_z + e^{23}_z$
2	$e^1_x + e^2_x - e^3_x - e^4_x + e^5_x - e^6_x + e^7_x + e^8_x + e^9_x - e^{12}_x + e^{13}_x + e^{14}_x - e^{15}_x - e^{16}_x + e^{17}_x - e^{18}_x - e^{19}_x - e^{20}_x + e^{22}_x + e^{23}_x$; $e^1_y + e^2_y + e^3_y + e^4_y + e^5_y + e^6_y + e^7_y + e^8_y + e^9_y + e^{12}_y + e^{13}_y + e^{14}_y + e^{15}_y + e^{16}_y + e^{17}_y + e^{18}_y + e^{19}_y + e^{20}_y + e^{22}_y + e^{23}_y$; $e^1_z + e^2_z - e^3_z - e^4_z + e^5_z + e^6_z - e^{13}_z - e^{14}_z + e^{15}_z + e^{16}_z - e^{17}_z + e^{18}_z$;
3	$e^1_x + e^2_x + e^3_x + e^4_x + e^5_x + e^6_x + e^7_x + e^8_x + e^9_x + e^{12}_x + e^{13}_x + e^{14}_x + e^{15}_x + e^{16}_x + e^{17}_x + e^{18}_x + e^{19}_x + e^{20}_x + e^{22}_x + e^{23}_x$; $e^1_y + e^2_y - e^3_y - e^4_y + e^5_y + e^6_y + e^7_y + e^8_y - e^{12}_y + e^{13}_y + e^{14}_y - e^{15}_y - e^{16}_y + e^{17}_y - e^{18}_y - e^{19}_y - e^{20}_y + e^{22}_y + e^{23}_y$; $e^1_z + e^2_z + e^3_z + e^4_z + e^5_z + e^6_z - e^{13}_z - e^{14}_z - e^{15}_z - e^{16}_z - e^{17}_z - e^{18}_z$
4	$e^1_x + e^2_x + e^3_x + e^4_x + e^5_x + e^6_x - e^{13}_x - e^{14}_x - e^{15}_x - e^{16}_x - e^{17}_x - e^{18}_x$; $e^1_y + e^2_y + e^3_y + e^4_y + e^5_y + e^6_y - e^{13}_y - e^{14}_y - e^{15}_y - e^{16}_y - e^{17}_y - e^{18}_y$; $e^1_z + e^2_z + e^3_z + e^4_z + e^5_z + e^6_z + e^7_z + e^8_z + e^9_z + e^{12}_z + e^{13}_z + e^{14}_z + e^{15}_z + e^{16}_z + e^{17}_z + e^{18}_z + e^{19}_z + e^{20}_z + e^{22}_z + e^{23}_z$

Таким образом, в ходе проделанной работы с помощью симметричного анализа были построены возможные магнитные структуры для полностью неупорядоченного и различных случаев упорядочения магнитных ионов кристалла Ni₅GeO₄(BO₃)₂. Как показывают результаты рентгеновских исследований кристаллической структуры Ni₅GeO₄(BO₃)₂, упорядочения Ni и Ge в позиции 4g даже после длительного отжига не наблюдается, магнитные ионы в позиции 4g располагаются случайным образом. Несмотря на то, что то Ni и Ge распределены равновероятно, возможно образование локального (ближнего) порядка в небольших областях кристалла. В этом случае различные области могут иметь несколько различную магнитную структуру. Как показали результаты расчета, если упорядочение происходит в рамках одной кристаллографической ячейки, то направления магнитных моментов либо лежат в плоскости ab, либо направлены вдоль оси c. В случае удвоенной ячейки различные типы упорядочения магнитных ионов дают более сложную картину: для некоторых представлений в этом случае магнитный момент для некоторых ионов имеет все три компоненты. Кроме этого, в ряде случаев при единственном фазовом переходе магнитоупорядоченная структура

может быть только ферромагнитной или наоборот только антиферромагнитной. Вероятнее всего реальная магнитная структура исследуемого соединения довольно сложная и может зависеть от условий роста кристалла (поскольку может изменяться распределение магнитных ионов в позиции 4g). Полученные в данной работе результаты помогут при анализе и интерпретации экспериментальных данных.

Библиографические ссылки

1. Ковалев О. В. Неприводимые представления пространственных групп : науч. изд. Киев : Изд-во АН УССР, 1961.
2. Изюмов Ю. А., Найш В. Е., Озеров Р. П. Нейтронография магнетиков : науч. изд. М. : Атомиздат, 1981.
3. Толедано Ж.-К.; Толедано П. Теория Ландау фазовых переходов : науч. изд. М. : Мир. 1994.
4. International Tables for Crystallography (2006). Vol. A. : sci. ed. / edit. Theo Hahn – Dordrecht (Netherlands): Springer, 2005.

© Назаренко И. И., Софронова С. Н., 2013

УДК 519.62

МОДАЛЬНЫЙ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ БАЛОК, ПОДАТЛИВЫХ ПРИ ТРАНСВЕРСАЛЬНОМ СДВИГЕ

В. А. Нестеров

Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева
 Россия, 660014, г. Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31. E-mail: gorkolya@mail.ru

Рассматривается задача о собственных колебаниях балки с низкой трансверсальной сдвиговой жесткостью. На основе теории пластин Рейсснера-Мидлина разработана конечно-элементная модель, в которой в качестве узловых неизвестных фигурируют углы трансверсального сдвига. Представлены результаты модальных расчетов изотропных, трехслойных и композитных балок при учете неклассических граничных условий.

Ключевые слова: балка, собственные колебания, трансверсальный сдвиг, метод конечных элементов.