

Таким образом, для  $\gamma \geq \gamma'_{cr} > \gamma''_{cr} \geq \gamma_2$  в смектике  $C$  реализуется «смешанное» состояние (полная модуляция (6б)), представляющее собой области чередования  $A$ - и  $C$ -фаз. Оно может быть достигнуто при достаточно малых  $|\tau| \sim 10^{-4}$ , когда требуемые деформации  $\gamma$  малы, и не происходит разрыва смектических слоев. Более подробное описание, касающееся модуляции в двумерном случае, будет приведено в другой статье. Мы благодарим Е. И. Каца за обсуждение работы.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Де Жен П. Ж. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
- [2] Clark N. A., Meyer R. B. Appl. Phys. Lett. 1973, vol. 22, N 10, p. 493—494.
- [3] Johnson D., Saupe A. Phys. Rev., 1977, vol. A15, N 5, p. 2079—2085.
- [4] Ribotta R. Phys. Lett., 1976, vol. A56, N 2, p. 130—132.
- [5] Orsay Group. Sol. St. Commun., 1971, vol. 9, N 10, p. 653—655.
- [6] Кац Е. И., Лебедев В. В. ЖЭТФ, 1986, т. 90, № 1, с. 111—123.
- [7] Ribotta R., Meyer R. B., Durand G. J. Phys., 1974, vol. 35, N 9, p. L161—L164.
- [8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 584 с.

Институт физики АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
31 июля 1987 г.

УДК 538 114.61

Физика твердого тела, том 50, в. 2, 1988  
Solid State Physics, vol. 30, № 2, 1988

## АНАЛИЗ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ $Tb_3Fe_5O_{12}$ В ПРИБЛИЖЕНИИ АНИЗОТРОПНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ

Р. Ф. Дружинина, В. В. Шкарубский

Гамильтониан иона  $Tb^{3+}$  в  $TbIG$  в позиции  $l$  ( $l=1, 6$ ) запишем в виде

$$\hat{H}_l = - \sum_{k=1}^2 I_{kl} z_k^{(l)} (g-1) S_{\sigma_k} (\hat{J} - 0.5 J_{n_l \sigma_l}, A_l n_k) + \sum_{k,q} \delta_k B_{kq} O_k^q, \quad (1)$$

где  $k=2, 4, 6$ ;  $q=0, 2, 4, 6$ ;  $\delta_2 \equiv \alpha$ ,  $\delta_4 \equiv \beta$ ,  $\delta_6 \equiv \gamma$  — параметры Стивенса;  $\sigma_l$  и  $\sigma_k$  — приведенные намагнитченности подрешеток  $Tb^{3+}$  и  $Fe^{3+}$  (1 — тетраэдр, 2 — октаэдр);  $A_l$  — матрицы преобразований систем координат от позиции  $Tb$  (1) к  $Tb$  ( $l$ ). Все остальные обозначения даны в [1-3]. Исходя из примерного значения молекулярного поля, действующего на  $Tb^{3+}$  со стороны  $Fe^{3+}$ ,  $250 \div 280$  кЭ [1], принято  $(I_{11} z_1^{(1)} + I_{21} z_2^{(1)}) = -27.8$  (в ед.  $10^{-23}$  Дж здесь и далее). Расчет параметров  $B_{kq}$  проведен в пределах сферы радиуса  $30\text{А}$  в модели точечных зарядов для ионов  $Tb^{3+}$  и  $O^{-2}$  и с учетом:

$kq$	20	22	40	42	44	60	62	64	66
$B_{kq}^1$	-238	357	112.8	428.8	141	13.6	2.4	-21.4	-182
$B_{kq}^2$	591	-887	-19.4	13.8	-110.6	1.2	-0.4	7.2	-22
$B_{kq}^3$	-478	716	8.2	9.2	32.2	0.2	0	3.2	-2
$\tilde{B}_{kq}$	-125	186	102.6	451.2	62.6	15	2	-11	-206.4
$B_{kq}$	-128	132	4	900	80	4	2	-2	-186

Примечание.  $B_{kq}^1, B_{kq}^2, B_{kq}^3$  — вклады в параметры кристаллического поля от ионов  $O^{-2}, Fe^{3+}, Tb^{3+}$  (в ед.  $10^{-23}$  Дж),  $\tilde{B}_{kq} = B_{kq}^1 + B_{kq}^2 + B_{kq}^3$  ( $\langle r^2 \rangle, \langle r^4 \rangle, \langle r^6 \rangle$  взяты из [1]);  $B_{kq}$  — параметры, принятые в расчетах при 77 К.

дипольных искажений для  $\text{Fe}^{3+}$ , что уменьшает вклад точечных зарядов для них в два раза. Результаты расчетов даны в таблице, там же даны принятые значения  $B_{kq}$  при 77 К, которые совпадают с расчетными по знаку и порядку величин. Намагниченность подрешеток  $\text{Tb}^{3+}$  на молекулу вычисляется по формуле ( $n \parallel C_3$ )

$$M = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \left( n, \sum_{i=1}^{13} \langle il | g \mu_B \hat{J} | il \rangle \exp(-\varepsilon_{il}/T) \right) \left/ \sum_{i=1}^{13} \exp(-\varepsilon_{il}/T) \right., \quad (2)$$

а  $\sigma_k$  берется из расчетов для YIG [3]. Константы анизотропии  $K_1$  и  $K_2$

$$K_1 = 4(F_2 - F_4), \quad K_2 = 27(F_3 - F_4) - 36(F_2 - F_4) \quad (3)$$

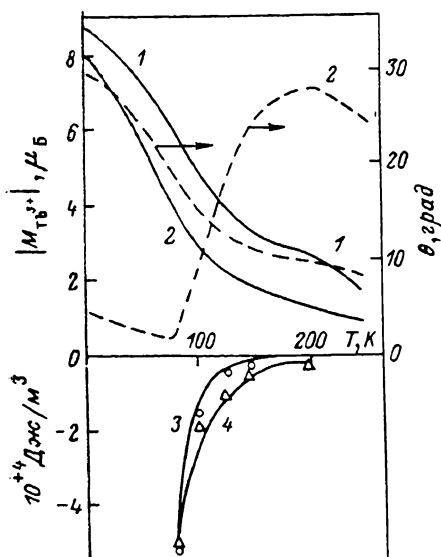


Рис. 1. Магнитный момент и угол при вершине первого (1) и второго (2) конусов подрешеток  $\text{Tb}^{3+}$  в зависимости от  $T$ ; 3 —  $0.1 K_2(T)$ ; 4 —  $K_1(T)$ .

Сплошные линии и штриховые — расчет, кружки и треугольники — эксперимент [7].

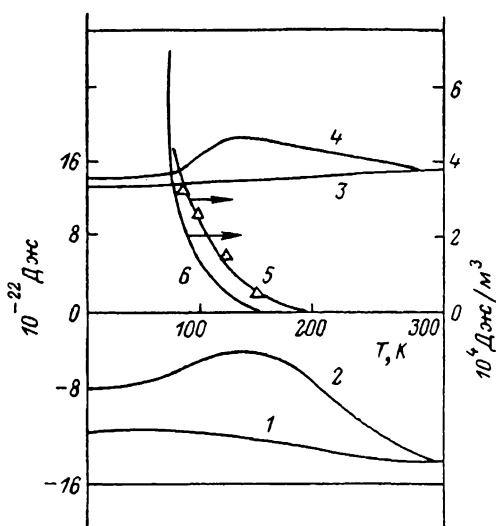


Рис. 2. Зависимость от температуры.

1 —  $B_{20}$ , 2 —  $B_{20}^{\text{KP}}$ , 3 —  $B_{22}$ , 4 —  $B_{22}^{\text{KP}}$ , 5 —  $K_1^{\text{KP}}$ , 6 —  $(-0.1 K_2^{\text{KP}})$ ,  $\triangle$  — экспериментальные данные для  $K_1^{\text{KP}}(T)$  [7].

вычисляются через значения свободной энергии

$$F_p = -T \ln \left\{ \prod_{k=1}^2 \left( \sum_{i=1}^6 \exp(-N_k(\text{Fe}) E_{ki}/T) \right) \prod_{l=1}^6 \left( \sum_{i=1}^{13} \exp(-N_l(\text{Tb}) \varepsilon_{li}/T) \right) \right\}, \quad (4)$$

где  $p=2, 3, 4$  отвечает направлению  $M(\text{Fe})$  вдоль осей  $C_2, C_3$  и  $C_4$ . При изменении температуры параметры  $B_{kq}$  меняются за счет теплового расширения решетки и магнитострикционных искажений (МИ). В расчетной модели производные, например  $B_{20}$  по  $a_0$  (постоянная решетки) и  $x, y, z$  (параметры решетки для  $O^{-2}$  в гранате), следующие (в ед.  $10^{-21}$  Дж)

$$(B_{20})'_{a_0} = 4.1 \text{ A}^{-1}, \quad (B_{20})'_x = 70, \quad (B_{20})'_y = 865, \quad (B_{20})'_z = -880 \quad (5)$$

при  $a_0 = 12.436 \text{ \AA}$ ,  $x = -0.0274$ ,  $y = 0.0554$ ,  $z = 0.1507$  [5]. Производные  $B_{4q}$  и  $B_{6q}$  на порядок меньше. Исходя из этого мы учитывали зависимость от  $T$  лишь  $B_{20}$  и  $B_{22}$ , чтобы объяснить магнитные свойства  $\text{TbIG}$ . В результате расчетов по (1)–(4) хорошо совпадают с экспериментом: общая намагниченность  $\text{TbIG}$ ;  $M^x(0) = 18 \mu_B$ ,  $M^y(0) = 18.2 \mu_B$ ;  $T_k^x = 240 \text{ K}$ ,  $T_k^y = 246 \text{ K}$  [6];  $M \parallel C_3$ ; константы анизотропии  $K_1^x(4.2) = -87$ ,  $K_2^x(4.2) = -2000$  (в ед.  $10^4 \text{ Дж/м}^3$  здесь и далее); при  $77 < T < 200 \text{ K}$   $K_n^x(T)$  и  $K_n^y(T)$  даны на рис. 1. Расчет дает для подрешеток  $\text{Tb}^{3+}$  два конуса с образующими  $8.7 \mu_B$ .

и  $8 \text{ мВ}$  и углами при высоте  $\theta_1 = 31^\circ$  и  $\theta_2 = 4^\circ$  при  $0 \text{ К}$ . Эволюция конусов с ростом  $T$  приведена на рис. 1, из которого следует, что первый конус схлопывается, а второй раскрывается. Расщепление термов  ${}^7F_8$  ионов  $\text{Tb}^{3+}$  в обоих конусах следующие: 0, 138, 188, 244, 306, 328, 342, 392, 460, 482, 505, 530, 688 и 0, 68, 90, 166, 206, 230, 284, 320, 362, 402, 482, 556, 578.

В [7] установлено, что  $K_1 = K_1^{\text{КР}} + K_1^{\text{МИ}}$ , причем при  $77 \text{ К}$   $K_1 = -5$ ,  $K_1^{\text{КР}} = 4$ ,  $K_1^{\text{МИ}} = -9$ , где  $K_1^{\text{КР}}$  — вклад кристаллического поля,  $K_1^{\text{МИ}}$  — вклад МИ. Этот удивительный результат, что вклад МИ меняет знак  $K_1$  и легкую ось  $\text{TbIG}$  от  $C_4$  к  $C_3$ , хотя сами по себе величины  $K_1$  очень велики, находит объяснение в нашей модели. Так как  $K_1 = f(B_{kq}(\Delta r))$  то, например, оценка одного из вкладов в  $\Delta K_1$  имеет вид

$$\Delta K_1 = \frac{\partial K_1}{\partial B_{20}} \left( \frac{\partial B_{20}}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial B_{20}}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial B_{20}}{\partial y} \Delta y + \frac{\partial B_{20}}{\partial z} \Delta z \right). \quad (6)$$

$\partial K_1 / \partial B_{20}$  определяется из феноменологических расчетов (1), (3), (4), которые дают ( $77 \text{ К}$ ): при  $B_{20} = -70$ ,  $B_{22} = 148$ ,  $K_1 = 4.3$ ; при  $B_{20} = -128$ ,  $B_{22} = -132$ ,  $K_1 = -4.8$ , т. е.  $\partial K_1 / \partial B_{20} \approx 1.6 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ . С другой стороны, взяв приращения параметров в пределах их погрешностей [5, 8],  $\Delta x = \Delta y = -2 \cdot 10^{-4}$ ,  $\Delta z = 3 \cdot 10^{-4}$ ,  $\Delta a_0 = a_0 \cdot \lambda = 5.5 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$  ( $\lambda = 4.5 \cdot 10^{-4}$  — константа магнитострикции [7]), используя (5), получаем  $\Delta B_{20} = -42.8$ . Отсюда  $\Delta K_1 = -1.6 \cdot 10^{26} \cdot 42.8 \cdot 10^{-23} = -7 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3$ , т. е. это величина, близкая к экспериментальному значению  $\Delta K_1 = K_1^{\text{МИ}} = -9 \cdot 10^4 \text{ Дж/м}^3$ . Далее нами определены  $B_{2q}^{\text{КР}}(T)$  и  $B_{2q}^{\text{МИ}}(T)$  ( $B_{2q} = B_{2q}^{\text{КР}} + B_{2q}^{\text{МИ}}$ ) и вычислены  $K_1^{\text{КР}}(T)$  и  $K_2^{\text{КР}}(T)$ , которые сопоставлены с экспериментом (рис. 2). Основная причина высокой чувствительности  $K_1$  и  $K_2$  к МИ состоит в том, что вклады ионов  $O^{2-}$  в  $B_{20}$  и  $B_{22}$  от разных сфер имеют большие значения разных знаков и в сумме почти компенсируются. МИ вызывает их раскомпенсацию, резкое изменение  $B_{2q}$  и соответственно  $K_1$  и  $K_2$ .

Авторы благодарят Р. З. Левитина, В. В. Дружинина, А. С. Лагутина за обсуждения и консультации.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Дружинин В. В., Шкарубский В. В., Чулков Н. М. ФТТ, 1983, т. 25, № 10, с. 2942—2949.
- [2] Шкарубский В. В., Дружинина Р. Ф., Лагутин А. С. ФТТ, 1985, т. 27, № 7, с. 2059—2063; Бабушкин Г. А., Дружинина Р. Ф., Шкарубский В. В. ФТТ, 1984, т. 26, № 8, с. 2534—2536.
- [3] Алексея Р. В., Дружинин В. В., Писарев Р. В., Шкарубский В. В. ФТТ, 1987, т. 29, № 4, с. 1048—1054.
- [4] Тейлор К., Дарби М. Физика редкоземельных соединений. М.: Мир, 1974. 45 с.
- [5] Fuess H., Bassi G., Bonnet M., Delapalme A. Sol. St. Commun., 1976, vol. 18, N 5, p. 557—562.
- [6] Geller S., Remeika J. P., Sherwood R. C., Williams H. J., Espinosa G. P. Phys. Rev., 1965, vol. 137A, p. 1034—1040.
- [7] Белов К. П., Гапеев А. К., Левитин Р. З., Маркосян А. С., Попов Ю. Ф. ЖЭТФ, 1975, т. 68, № 1, с. 241—248.
- [8] Духовская Е. Л., Саксанов Ю. Г. Кристаллография, 1977, т. 22, № 1092—1095.

Московский  
инженерно-физический институт  
Москва

Поступило в Редакцию  
8 июня 1987 г.  
В окончательной редакции  
6 августа 1987 г.