

Оценим условия возникновения сегнетоэластического перехода. Для  $nr_c^3 \gg 1$  и  $T \geq T_d/2$  в (6)  $C(r_{ij}) > D(r_{ij})$ , что приводит к

$$H_{\phi}^{\text{оп}} = - \sum_{i, j, \beta} V(r_{ij}) \Omega_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{r}_i) \Omega_{\beta}^{\alpha'}(\mathbf{r}_j) T_{\beta\beta}^{\alpha\alpha'}(2) T_{\beta\beta}^{\alpha'\alpha}(2), \quad (8)$$

$$V(r_{ij}) = \{kT [G(q_{11} - q_{12})]^2 / (54\pi^2 s^4)\} \exp(-2r_{ij}/r_0) / r_{ij}^2.$$

Используя (8), в приближении среднего поля ( $z \gg 1$ ,  $z = nr_c^3/2$  — среднее число соседей) получаем «смягчение» для  $c_{11} - c_{12}$  при  $T > T_c$  ( $T_c$  — температура сегнетоэластического перехода)

$$c_{11} - c_{12} = c_{11}(T = \infty) - c_{12}(T = \infty) - n(\Omega_{\parallel} - \Omega_{\perp})^2 / 3k(T - T_c). \quad (9)$$

Для  $\text{KTaO}_3$  с концентрацией примесей  $\text{Li } n \sim 10 \div 15\%$  и  $\Omega_{\parallel} - \Omega_{\perp} \sim 1 \div 5 \cdot 10^{-19}$  Дж, получаем  $T_c \leq 100$  К, а концентрационная зависимость  $T_c$  имеет вид  $T_c \sim n^{2/3}$ . В [7, 8] наблюдалось «смягчение» упругих модулей  $c_{11} - c_{12}$ , при этом  $c_{44}$  практически не зависел от температуры, что может свидетельствовать о существовании сегнетоэластического перехода. Приведенное выше рассмотрение годится для  $nr_c^3 \gg 1$  ( $n \geq 10\%$ ), где справедливо приближение среднего поля. Вопрос о низкотемпературной фазе при  $nr_c^3 \ll 1$  более сложный, так как  $H_{\phi}^{\text{ак}} \gg H_{\phi}^{\text{оп}}$ . Это должно приводить к состоянию ориентационного стекла, но присутствие в (3) членов типа «случайное поле деформации» значительно осложняет рассмотрение структуры низкотемпературной фазы.

Авторы благодарны В. С. Вихнину и Н. К. Юшину за обсуждение результатов.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Вугмейстер Б. Е., Глинчук М. Д. УФН, 1985, т. 146, № 3, с. 459—491.
- [2] Вихнин В. С. ФТТ, 1981, т. 23, № 8, с. 2370—2375.
- [3] Dugaev V. K., Litvinov V. J., Tovstyuk K. D. Phys. Lett., 1982, vol. 92A, N 4, p. 186—188.
- [4] Ивлев М. П., Сазненко В. П. ФТТ, 1986, т. 28, № 2, с. 632—634.
- [5] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М.: Мир, 1981. 439 с.
- [6] Uwe H., Sacido J. Phys. Rev. B, 1977, vol. 15, N 1, p. 337—345.
- [7] Höchli H. T., Weibel H. E., Rehwald W. J. Phys. C, 1982, vol. 15, № 30, p. 6129—6140.
- [8] Смоленский Г. А., Сотников А. В., Сыркинов П. П., Юшин Н. К. Изв. АН СССР, сер. физ., 1983, т. 47, № 3, с. 603—606.

Институт проблем материаловедения  
АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
27 июля 1987 г.  
В окончательной редакции  
5 ноября 1987 г.

## СУЩЕСТВОВАНИЕ МАГНИТОДИСТОРСИОННОЙ ФАЗЫ В ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Б. Г. Вехтер

1. В кристаллах, обладающих ионной подрешеткой с вырожденным основным состоянием, с понижением температуры происходят фазовые переходы в упорядоченную фазу, где это вырождение снято. Если указанное вырождение крамерсово, то переход оказывается магнитным. Если вырождение некрамерсово, то поскольку оно может быть снято как магнитными, так и электростатическими воздействиями, возможны как маг-

нитный, так и структурный фазовые переходы. Реализуется при этом, как правило, лишь один из них — отвечающий более сильному взаимодействию, которое вызывает большее расщепление. Слабое взаимодействие оказывается подавленным более сильным и соответствующее ему упорядочение не реализуется [1].

Так, например, в  $TmVO_4$  магнитные взаимодействия могли бы привести к антиферромагнитному фазовому переходу с  $T_N=0.5$  К [2], расщепляющему основной некрамерсов дублет ионов  $Tm^{3+}$ . Однако более сильные электростатические взаимодействия узлов через поле фононов (кооперативный эффект Яна—Теллера) вызывают при  $T_c=2.1$  К структурный фазовый переход, из-за которого при  $T < T_c$  магнитные моменты узлов подавлены (дублет уже расщеплен) и магнитное упорядочение не возникает. Обратная ситуация имеет место в  $HoPO_4$ , где основное состояние ионов  $Ho^{3+}$  также некрамерсов дублет [3]. В нем при  $T_N=2.2$  К возникает антиферромагнитное упорядочение, подавляющее структурный переход, возможный при отсутствии конкурирующих магнитных взаимодействий при более низкой температуре. Если, однако, упорядочение, отвечающее сильному взаимодействию, по каким-либо причинам ослаблено, то на этом фоне может возникнуть упорядочение, соответствующее слабому взаимодействию. Так, в [4] было показано, что в доменной стенке, разделяющей фазы с упорядочением, которое соответствует сильному взаимодействию, может при определенных условиях возникнуть и упорядочение, определяемое слабым взаимодействием. Связанные с этим эффекты наблюдаемы при достаточной концентрации доменов. Представляет интерес поиск ситуаций, при которых стабилизация «невыгодной» фазы происходит во всем объеме кристалла. Очевидно, что в случае, когда более выгодное упорядочение оказывается антиферротипа (антиферромагнетик, антиферрозластик), оно может быть дестабилизировано внешними полями (магнитным, давлением). При этом также можно ожидать возникновения в поле упорядочений, отвечающих слабым взаимодействиям. Ниже эта ситуация исследуется на примере тетрагонального кристалла (типа  $TmVO_4$ ,  $HoPO_4$ ) с подрешеткой ионов, у которых основное состояние является некрамерсовым дублетом.

2. Некрамерсов дублет удобно описывать псевдоспином  $S=1/2$ . Взаимодействие с магнитным полем, направленным вдоль тетрагональной оси  $c$ , выражается через одну его компоненту, например,  $S_z$ . Собственными состояниями  $S_z$  оказываются, таким образом, состояния с определенным значением магнитного момента вдоль оси  $c$ . С магнитным полем,  $H \perp c$  некрамерсов дублет в тетрагональных кристаллах не взаимодействует,  $g_1=0$ . Собственные же функции компонент псевдоспина  $S_x$  и  $S_y$  отвечают состояниям с определенным значением электронного квадрупольного момента и через эти компоненты выражается оператор взаимодействия дублета с низкосимметричными (преобразующимися по  $b_1$  и  $b_2$  представлениям группы  $D_{4h}$ ) электростатическими полями решетки. Гамильтониан, учитывающий магнитные и ян-теллеровские (через смещения, например,  $b_1$ -типа) квадруполь-квадрупольные взаимодействия, может быть приведен к виду [1]

$$H = - \sum_{ij} (J_{ij} S_z^i S_z^j + A_{ij} S_x^i S_x^j). \quad (1)$$

При  $|J| > |A|$  ( $J = \sum_i J_{ij}$ ,  $A = \sum_i A_{ij}$ ) в кристалле реализуется магнитное упорядочение ( $\bar{S}_z \neq 0$ ,  $\bar{S}_x = 0$ ), если выполняется обратное соотношение, то возникает структурное упорядочение ( $\bar{S}_x \neq 0$ ,  $\bar{S}_z = 0$ ) [1]. Предположим, что энергетически более выгодное упорядочение оказывается антиферротипа и исследуем, как влияет внешнее поле на относительную стабильность различных упорядочений. Для конкретности предположим, что антиферромагнитные взаимодействия преобладают, как это имеет место, например в  $HoPO_4$ ,  $HoAsO_4$ , над дисторсионными, и рас-

смотрим поведение этой системы в магнитном поле (при более сильном антиферродисторсионном взаимодействии роль поля выполняло бы внешнее давление). Гамильтониан (1), к которому добавлен зеемановский член  $-\mu H \sum_i S_z^i$ , совпадает по внешнему виду с гамильтонианом анизотропного (типа легкая ось) антиферромагнетика в продольном поле [5] и его анализ проводится аналогично. Вводя в приближении молекулярного поля две подрешетки I и II, энергии которых есть  $\epsilon_\alpha^\pm = \pm [(J \bar{S}_x^\alpha + \mu H)^2 + (A \bar{S}_x^\alpha)^2]^{1/2}$  ( $\alpha = I, II$ ), находим свободную энергию  $F = -kT \ln Z$ . Ее минимизация по параметрам порядка  $\bar{S}_{x,\alpha}$  приводит к системе четырех уравнений  $\partial F / \partial \bar{S}_i^\alpha = 0$ , решение которой, отвечающее меньшей свободной энергии, соответствует равновесным  $\bar{S}_i^\alpha$ . Оказывается, что в определенной области магнитных полей и температур действительно реализуется про-

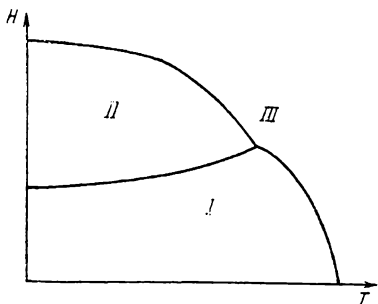


Рис. 1. Антиферромагнитная (I), магнито-дисторсионная (II) и парамагнитная (III) фазы.

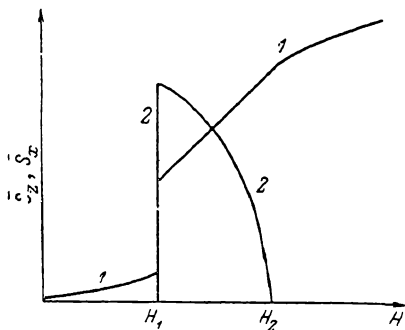


Рис. 2. Полевые зависимости магнитного момента (1) и спонтанной деформации (2).

межточечная магнито-дисторсионная фаза II ( $\bar{S}_z^I = \bar{S}_z^{II} \neq 0$ ,  $\bar{S}_x^\alpha \neq 0$ ), в которой отличны от нуля как магнитные моменты ян-теллеровских центров, пропорциональные  $\bar{S}_z$ , так и локальные деформации ( $\sim \bar{S}_x$ ) (рис. 1). Переход из чисто антиферромагнитной фазы I ( $\bar{S}_z^I = -\bar{S}_z^{II} \neq 0$ ,  $\bar{S}_x^\alpha = 0$ ) в фазу II первого, а из фазы II к парамагнитной фазе III ( $\bar{S}_z^I = \bar{S}_z^{II} \neq 0$ ,  $\bar{S}_x^\alpha = 0$ ) — второго рода. Магнито-дисторсионная фаза II характеризуется своеобразным поведением магнитных, структурных и упругих свойств. Если  $A > 0$  (как это имеет место в большинстве редкоземельных ванадатов, арсенатов и фосфатов), то в фазе II  $\bar{S}_x = \bar{S}_x^{II}$  и кристалл искажен. Отметим, что в отличие от привычной магнитострикции, когда в поле возникает параллельная ему деформация, в данном случае в поле, параллельном тетрагональной оси, возникает орторомбическая деформация в базисной ( $xy$ ) плоскости. Зависимость этой деформации  $u = g_0 (\bar{S}_x^I + \bar{S}_x^{II})$ , где  $g_0$  — константа электрон-деформационной связи [6], от магнитного поля носит необычный характер. Деформация возникает скачком при  $H = H_1(T)$ , ее величина тем больше, чем ниже температура и чем ближе друг к другу значения магнитного  $|J|$  и дисторсионного  $A$  молекулярных полей; при дальнейшем увеличении поля деформация плавно уменьшается и обращается в нуль при  $H = H_2(T)$  (рис. 2). Нетрудно показать, что при  $T = 0$   $\mu H_1 = \sqrt{(-J-A)(-J+A)}$ ,  $\mu H_2 = -J + A$ ,  $\bar{S}_z(H) = \sqrt{1 - \mu^2 H^2 (-J+A)^{-2}}$ . Модуль упругости, отвечающий этой деформации, внутри фазы II уменьшается с ростом поля и обращается в нуль на границе фазы. Магнитный момент кристалла  $M = \mu (\bar{S}_z^I + \bar{S}_z^{II})$  увеличивается скачком при  $H = H_1(T)$  — метамагнитное поведение (рис. 2). Величина скачка  $\Delta \bar{S}_z$  тем меньше, чем выше температура и тем ближе значения  $|J|$  и  $A$ , при  $T = 0$   $\Delta \bar{S}_z = \sqrt{(-J-A)(-J+A)^{-1}}$ . Внутри фазы II магнитный момент линеен по полю  $\bar{S}_z = \mu H (-J+A)^{-1}$ , а одноионные уровни энергии, полученные в приближении молекулярного поля, не зависят

от  $H$ : ян-теллеровские корреляции приводят к отталкиванию уровней вблизи точки их возможного (при  $\bar{S}_x=0$ ) пересечения.

3. Таким образом, в системах антиферритида с конкурирующими взаимодействиями может существовать в поле фаза, где реализованы оба упорядочения. Удобным объектом, где можно было бы наблюдать магнитодисторсионную фазу, представляется изинговские антиферромагнетики типа  $\text{HoPO}_4$ ,  $\text{HoAsO}_4$ . Совместное исследование их магнитных и упругих свойств, аналогичное проведенному недавно для  $\text{CePb}_3$  [7] и позволившее обнаружить в нем неизвестную ранее фазу, представляется поэтому весьма интересным.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] *Vekhter B. G., Kaplan M. D.* Phys. Lett., 1973, vol. 43A, N 3, p. 389—390.
- [2] *Cook U., Swithenby S. J., Wells M. R.* Sol. St. Commun., 1972, vol. 10, N 2, p. 265—267.
- [3] *Laugsch J., Kahle H. C., Schwab M., Wuchner W.* Physica B, 1975, vol. 80, N 2, p. 269—286.
- [4] *Булаевский Л. И., Вектер Б. Г.* ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 4 (10), с. 1444—1453.
- [5] *Вонсовский С. В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
- [6] *Gehring G. A., Gehring K. A.* Rep. Prog. Phys., 1975, vol. 38, N 1, p. 1—89.
- [7] *Nikl D., Kouroudis I., Assmus W., Luthi B., Bruls G., Welp U.* Phys. Rev., 1987, vol. B35, N 13, p. 6864—6867.

Институт химии АН МССР  
Кишинев

Поступило в Редакцию  
9 ноября 1987 г.

УДК 537.311

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988  
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ГИБРИДИЗОВАННЫХ $f$ -ЭЛЕКТРОНОВ С УЧЕТОМ РЕАЛЬНОГО ВЫРОЖДЕНИЯ $f$ -ОБОЛОЧЕК

Ю. П. Ирхин

Гибридизация  $f$ -электронов с электронами проводимости является одним из основных эффектов в редкоземельных (РЗ) и урановых соединениях с промежуточной валентностью и с тяжелыми фермионами. При этом важную роль играет величина параметра гибридизации  $V$ , который вместе с параметрами  $\epsilon_f$  (энергия  $f$ -электрона) и  $\epsilon_F$  (энергия Ферми) определяет области существования различных возможных режимов (промежуточная валентность, резонанс Абрикосова—Сула, магнитное упорядочение).

В теоретических моделях  $V$  обычно рассматривается как феноменологический параметр, однако этого недостаточно, например, для исследования зависимости эффекта гибридизации от номера редкоземельного элемента и для перехода к количественным расчетам. Существенную роль при этом играет вырождение соответствующих конфигураций  $f^n$  и  $f^{n-1}$ , сильно меняющееся в РЗ ряде. Так, степень вырождения  $\nu$  весьма важна для определения положения  $\epsilon_F$  относительно вершины пика  $f$ -полосы (или резонанса Абрикосова—Сула)  $\epsilon_0$ . Практически большие наблюдаемые значения электронной теплоемкости (или эффективной массы для тяжелых фермионов) могут быть получены в теории только при  $\epsilon_f = \epsilon_0$  (см. обсуждение этой проблемы для  $\text{UBe}_{13}$  в обзоре [1]), что осуществляется при величине  $\nu=2$ , которое, как правило, не соответствует реально имеющемуся вырождению. Вторым примером существенного влияния степени вырождения является число Вильсона  $R = (\chi T/c) (\pi k_B / \mu_B^2) / 3$  ( $\chi$  — парамагнитная восприимчивость,  $c$  — электронная теплоемкость).