

О механизме формирования равновесной доменной структуры в кристаллах, испытывающих термоупругие фазовые переходы

© Е.В. Гомонай^{*,**}, В.М. Локтев^{**}

* Национальный технический университет Украины „КПИ“, 03056 Киев, Украина

** Институт теоретической физики Национальной академии наук Украины, 03143 Киев, Украина

E-mail: malyshev@ukrpack.net, vloktev@bitp.kiev.ua

(Поступила в Редакцию 26 июля 2004 г.)

В окончательной редакции 28 октября 2004 г.)

Предложен механизм формирования равновесной доменной структуры при термоупругих фазовых переходах, обусловленный дальнедействующими полями упругих деформаций, которые создаются „упругими зарядами“ на свободной поверхности кристалла. Предполагается, что при фазовом переходе наряду с первичным (антиферромагнитным, мартенситным) параметром порядка в кристалле возникают жестко связанные с ним внутренние (квазипластические) напряжения, ориентация которых относительно кристаллографических осей может меняться под действием внешних полей. „Упругие заряды“ возникают за счет тех компонент тензора внутренних напряжений, поток которых через поверхность кристалла отличен от нуля. Получено выражение для нелокальной энергии „раздеформирования“ и показано, что при определенной форме образца энергетически более выгодным является неоднородное распределение первичного параметра порядка, соответствующее доменной структуре. Продемонстрирована зависимость характерного поля монодоменизации от формы кристалла.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки Украины (грант N Ф7/514-2001) и частично в рамках тематического и плана исследований НТУУ „КПИ“ (№ госрегистрации 0103U000303).

1. Экспериментально установлено и не вызывает сомнения тот факт, что фазовые переходы в веществах со спонтанной стрикцией сопровождаются формированием доменной структуры, равновесной и обратимо перестраиваемой внешним полем, и необходимы специальные усилия для получения в упорядоченной фазе однородного состояния [1–10]. К веществам такого типа можно отнести, в частности, антиферромагнетики с вырожденным направлением вектора антиферромагнетизма,¹ а также термоупругие мартенситы. При этом вопрос о причине формирования термодинамически равновесной доменной структуры в этих кристаллах фактически остается открытым.

Как правило, возникновение доменной структуры в антиферромагнетиках связывают с технологическими процессами выращивания кристалла или энтропийным фактором [11], а в мартенситах — с кинетикой превращения, в которой существенную роль играет межфазная граница, навязывающая низкотемпературной фазе неоднородную структуру за счет релаксации внутренних упругих напряжений [12,13]. Аналогичным образом объясняется формирование неоднородных состояний в полисинтетических структурах [14], состоящих из жестко связанных слоев с различными упругими свойствами. Более того, считается совершенно очевидным тот факт, что основное состояние таких кристаллов, соответствующее

¹ Речь идет о так называемых ориентационных доменах, которые отличаются ориентацией легкой оси для вектора антиферромагнетизма. Домены, отличающиеся только порядком чередования магнитных подрешеток, в настоящей работе не рассматриваются.

ющее минимуму термодинамического потенциала² даже при учете стрикционных взаимодействий должно быть однородным. К примеру, в антиферромагнетиках, которые подробнее рассматриваются далее, это утверждение обосновывается наличием в выражении для термодинамического потенциала кристалла слагаемого $\hat{\Lambda} : \hat{u} \otimes \mathbf{l} \otimes \mathbf{l}$, линейного по тензору деформаций \hat{u} и зависящего от вектора антиферромагнетизма \mathbf{l} ; тензор 4-го ранга $\hat{\Lambda}$ определяет величину и направление магнитоупругой связи в кристалле. Множитель

$$\hat{\sigma}^{\text{in}}[\mathbf{l}] \equiv \hat{\Lambda} : \mathbf{l} \otimes \mathbf{l}, \quad \text{или} \quad \sigma_{ji}^{\text{in}}[\mathbf{l}] \equiv -\Lambda_{jklm} l_k l_m \quad (1)$$

играет роль тензора внутренних напряжений,³ обусловленных возникновением первичного параметра порядка, роль которого играет вектор \mathbf{l} . Неявное (и потому, как правило, не обсуждаемое) априорное предположение о том, что тензор внутренних напряжений $\hat{\sigma}^{\text{in}}$ задается только локальной величиной первичного параметра порядка, а деформация лишь под него подстраивается, естественным образом приводит к выводу о том, что наименьшей энергией обладает состояние с однородным распределением как параметра порядка, так и соответствующей ему спонтанной деформации.

² В зависимости от условий, свободной энергии Гельмгольца (внутренний параметр деформация) или потенциала Гиббса (внутренний параметр напряжения).

³ Здесь следуем терминологии Клемана [15,16], который предложил рассматривать наведенные фазовым переходом напряжения как квазипластические, или внутренние, в отличие от внешних, вызванных механической нагрузкой образца.

Однако такое допущение справедливо только в неограниченных (бесконечно больших) образцах. Действительно, в бесконечном образце, группа симметрии которого включает в себя трансляции на любой сколь угодно малый вектор смещения,⁴ пространственно однородное состояние обладает наивысшей трансляционной симметрией, совместимой с симметрией кристалла, и поэтому может соответствовать минимуму термодинамического потенциала образца в целом.

В образце конечных размеров, группа симметрии которого в общем случае не включает операций трансляции, состояние с однородно распределенным параметром порядка не является выделенным (если только не случится так, что его симметрия совпадает с симметрией образца в целом). Более того, с учетом дальнедействующего характера сил упругости (в сплошной среде) нет оснований предполагать, что основное состояние вообще должно быть однородным, поскольку потенциал взаимодействия между точками, расположенными вблизи и вдали от поверхности, должен быть различным.

Таким образом, анализ локальной энергии упругих деформаций в кристалле, испытывающем фазовый переход, адекватно описывает состояние кристалла только в термодинамическом пределе, в котором можно пренебречь наличием поверхности (граничных условий).

Формально возможность (и необходимость) формирования равновесной доменной структуры в образцах конечных размеров можно объяснить, если отказаться от предположения о том, что спонтанная стрижка определяется только локальным значением тензора внутренних напряжений $\hat{\sigma}^{\text{in}}$ и последовательно учесть условия на границе образца. Выбор граничных условий определяется конкретной экспериментальной ситуацией. В случае когда поверхность образца, испытывающего магнитоупругий фазовый переход, является недеформируемой (т.е. вектор смещения на ней равен нулю), неоднородное состояние, как показано в работах [17,18], может оказаться энергетически выгодным за счет уменьшения несовместности наведенных переходом деформаций в объеме и на поверхности образца. Однако применение такой модели накладывает серьезные ограничения на свойства поверхности (которые должны существенно отличаться от свойств объема). В другом более распространенном случае поверхность образца является свободной, что соответствует обращению на ней в нуль тензора напряжений. Именно рассмотрение механизма формирования доменной структуры в свободном кристалле является основной целью настоящей работы.

2. Итак, предположим, что первичный параметр порядка (например, вектор антиферромагнетизма \mathbf{l}) и соответственно тензор внутренних напряжений $\hat{\sigma}^{\text{in}}$ зависят от координаты; будем искать такое совместное распределение векторных \mathbf{l} и тензорных $\hat{u}(\mathbf{r})$ полей, которое соответствует минимуму термодинамического потенциала F всего образца конечного объема V .

Выражение для термодинамического потенциала может быть представлено в виде суммы трех вкладов — магнитной природы (или, в более общем случае, зависящего только от первичного параметра порядка) $f^{\text{mag}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})]$, упругого, в рамках линейной теории упругости зависящего от тензора модулей упругости \hat{c} (4-го ранга) и тензора упругих деформаций \hat{u} и, наконец, обсуждавшегося выше слагаемого $\hat{\sigma}^{\text{in}} : \hat{u}$, определяющего магнитоупругие взаимодействия. В результате полная энергия кристалла со свободной поверхностью является функционалом следующего вида:

$$F[\mathbf{l}(\mathbf{r}), \hat{u}(\mathbf{r}); \mathbf{r}] = \int_V \left\{ f^{\text{mag}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \hat{u} : \hat{c} : \hat{u} - \hat{\sigma}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})] : \hat{u} \right\} d\mathbf{r}. \quad (2)$$

Экстремум выражения (2) соответствует обращению в нуль первой вариации функционала по компонентам вектора антиферромагнетизма \mathbf{l} и вектора смещений \mathbf{u} и приводит к системе взаимосвязанных уравнений⁵

$$\frac{\partial}{\partial r_k} c_{jklm} \frac{\partial u_m}{\partial r_l} = - \frac{\partial}{\partial r_k} (\Lambda_{jklm} l_l l_m), \quad (3)$$

$$\frac{\delta f^{\text{mag}}}{\delta l_j} = - \Lambda_{jklm} l_l \frac{\partial u_k}{\partial r_m}, \quad (\mathbf{r} \in V) \quad (4)$$

с граничными условиями⁶

$$n_k c_{jklm} \frac{\partial u_m}{\partial r_l}(\mathbf{r}_S) = - \Lambda_{jklm} l_l l_m n_k(\mathbf{r}_S), \quad (\mathbf{r}_S \in S), \quad (5)$$

где \mathbf{n} — нормаль к поверхности образца S в произвольной ее точке \mathbf{r}_S . В формулах (3)–(5) использован явный вид (1) тензора внутренних напряжений для антиферромагнетика. Граничные условия (5) при этом предполагают, что антиферромагнитный порядок и связанный с ним тензор внутренних напряжений возникает в каждой точке образца, в том числе и на поверхности.⁷

Уравнения (3) и (5) позволяют исключить из рассмотрения поле смещений (деформаций), если известна функция Грина $G_{jk}(\mathbf{r})$ бесконечной упругой среды, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial}{\partial r_k} c_{jklm} \frac{\partial}{\partial r_l} G_{nm}(\mathbf{r}) + \delta_{jn} \delta(\mathbf{r}) = 0 \quad (6)$$

с заданным тензором модулей упругости \hat{c} .

⁵ Аналогичные уравнения для ферромагнитных кристаллов с учетом магнитоупругой связи приведены, например, в работе [19], где, в частности, обсуждается влияние магнитоупругой связи на форму магнитных доменов, сформировавшихся за счет магнитоэлектрических взаимодействий. Следует, однако, подчеркнуть, что в ферромагнетиках упругая система не рассматривается как доменообразующая, что делает задачу о причинах формирования доменов в антиферромагнетиках принципиальной.

⁶ При наличии в магнитной энергии $f^{\text{mag}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})]$ пространственно-неоднородных слагаемых граничные условия должны быть дополнены уравнениями для градиента компонент вектора \mathbf{l} на поверхности образца.

⁷ Для простоты предполагаем, что значения магнитных и упругих констант одинаковы на поверхности образца и в его объеме. В общем случае значение коэффициентов \hat{c} и Λ на поверхности может отличаться от объемных.

⁴ В приближении сплошной среды.

В этом случае, как хорошо известно из теории упругости [20], вектор смещений можно представить в виде интеграла

$$u_j(\mathbf{r}) = -\frac{\partial}{\partial r_k} \int_V G_{jm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_{km}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r}')] d\mathbf{r}'. \quad (7)$$

Подстановка (7) в выражение (2) для термодинамического потенциала позволяет привести последние два его слагаемые к виду

$$F_{\text{m-el}} = \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{r} \sigma_{jk}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})] \frac{\partial^2}{\partial r_j \partial r_l} \int_V d\mathbf{r}' \sigma_{lm}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r}')] G_{km}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (8)$$

С учетом сингулярных свойств функции Грина при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow 0$ интеграл в (8) представляется в виде суммы двух слагаемых

$$F_{\text{m-el}} = -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{jl}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})] c_{jklm}^{-1} \sigma_{km}^{\text{in}}[\mathbf{l}(\mathbf{r})] + \Phi_{\text{dd}}^{\text{el}}. \quad (9)$$

Первое слагаемое в этой сумме представляет собой упомянутый выше локальный вклад магнитоупругих взаимодействий в энергию кристалла, который обычно учитывают при определении спонтанных деформаций, возникающих при фазовом переходе. Все входящие в него величины определяются в одной и той же точке кристалла \mathbf{r} , и, следовательно, учет только этого слагаемого не может служить основой для объяснения возникновения термодинамически равновесного неоднородного состояния. Знак минус, стоящий перед интегралом, означает понижение термодинамического потенциала за счет возникновения в данной точке „правильных“ деформаций, которые соответствуют первичному параметру порядка и определяются только его локальным значением.

Второе слагаемое в (9) представляется в виде нелокального функционала

$$\Phi_{\text{dd}}^{\text{el}} = \lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{r} \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|>\rho} d\mathbf{r}' \sigma_{jk}^{\text{in}}(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial r_j \partial r_l} \times G_{km}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_{lm}^{\text{in}}(\mathbf{r}'), \quad (10)$$

который определяет энергию взаимодействия внутренних, квазипластических упругих напряжений (см. (1)). Согласно определению, они создаются двумя произвольно (в смысле ориентации \mathbf{l}) упорядоченными областями в окрестностях точек \mathbf{r} и \mathbf{r}' при условии, что расстояние между ними превышает некоторую физическую малую макроскопическую длину ρ , которая существенно больше межатомных расстояний a (на них определяющим является вклад локальных потенциалов), но много меньше характерного размера d_D упругих (и магнитных⁸)

⁸ В большинстве экспериментально наблюдаемых случаев упругие домены в антиферро- и ферромагнетиках совпадают с ориентационными магнитными, как это имеет место, например, в кристаллах Ni_2GaMn [5], NiO [10] и LaSrCuO [9].

неоднородностей (доменов), так что имеет место соотношение

$$a \ll \rho \ll d_D.$$

Если учесть основные свойства функции Грина уравнения (6), а именно то, что на бесконечности она убывает как $1/r$ независимо от симметрии кристалла, становится ясно, что полученное выражение (10) имеет смысл энергии взаимодействия между „упругими диполями“, представляемыми тензорами внутренних напряжений σ^{in} . Фактически, как это отмечалось, например, в работе [21], функция Грина упругой среды аналогична функции Грина оператора Лапласа в среде с нетривиальной (анизотропной) метрикой, и поэтому формула (10) может рассматриваться также как обобщение хорошо известного в теории ферромагнетизма выражения для энергии диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами, локализованными в разных точках среды.

Таким образом, при переходе в упорядоченное состояние дальнедействующие нелокальные взаимодействия могут возникать не только непосредственно, вследствие магнитных (как в случае ферромагнетиков) и электрических (как в случае сегнетоэлектриков или волн зарядовой плотности), но и опосредовано, за счет упругих взаимодействий в кристалле при наличии в нем достаточно сильной связи между параметром порядка и упругой подсистемой.

3. Покажем теперь, что в случае бесконечной среды пространственно-неоднородное решение соответствует минимуму функционала (2), а в ограниченном образце со свободной поверхностью учет вклада „диполь-дипольных“ взаимодействий (10) может привести к неоднородному распределению первичного параметра порядка (т.е. к доменам), соответствующего минимуму термодинамического потенциала (2).

Действительно, в бесконечно-большом образце интеграл (10) с помощью теоремы Остроградского–Гаусса приводится к виду

$$\Phi_{\text{dd}}^{\text{el}} = -\frac{1}{2} \int_V d\mathbf{r} \frac{\partial \sigma_{jk}^{\text{in}}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \int d\mathbf{r}' G_{km}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\partial \sigma_{lm}^{\text{in}}(\mathbf{r}')}{\partial r'_l}, \quad (11)$$

поскольку на бесконечности поверхностные напряжения исчезают. Исходя из условия устойчивости упругой подсистемы можно показать,⁹ что правая часть выражения (11) неотрицательна при любых значениях σ^{in} . Следовательно, наименьшему значению потенциала Гиббса будет соответствовать состояние с однородным тензором внутренних напряжений σ^{in} и соответственно однородным распределением первичного параметра порядка \mathbf{l} .

Совершенно иные возможности реализуются при учете конечных размеров кристалла. В этом случае граничные условия (5) могут не выполняться при тех

⁹ Для этого достаточно перейти к Фурье-образам всех входящих в выражение (11) функций и воспользоваться условием положительной определенности спектра длинноволновых акустических колебаний.

ориентациях $\hat{\sigma}^{\text{in}}$ и \mathbf{l} , которые соответствуют минимуму локальной плотности свободной энергии кристалла. Действительно, для состояния с пространственно-независимым распределением параметра порядка и соответствующего ему тензора внутренних напряжений $\langle \hat{\sigma}^{\text{in}} \rangle$ (угловые скобки означают усреднение по объему образца) выражение для „диполь-дипольной“ энергии (10) можно записать как

$$\Phi_{\text{dd}}^{\text{dest}} = \frac{V}{2} \langle \sigma_{jl}^{\text{in}} \rangle \mathfrak{K}_{jklm} \langle \sigma_{km}^{\text{in}} \rangle, \quad (12)$$

где введен тензор 4-го ранга

$$\mathfrak{K}_{jklm} \equiv \frac{\partial^2}{\partial r_k \partial r_m} \int_V G_{jl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (13)$$

которой по аналогии с магнетизмом можно назвать тензором „раздеформирующих“ („destressing“) коэффициентов.

Вклад (12) в термодинамический потенциал кристалла, связанный с ненулевыми средними (либо просто однородными) внутренними напряжениями, может приводить только к повышению полной энергии образца, поскольку, как легко убедиться, тензор \mathfrak{K} является положительно определенным. Такое повышение энергии, обусловленное формой образца, может и должно конкурировать с прочими (как однородными, так и неоднородными) вкладами, обусловленными изменением термодинамического состояния кристалла, поскольку соответствующее слагаемое (см. (12)) пропорционально объему кристалла V .

Например, в частном случае образца в форме тонкой пластинки с нормалью \mathbf{n} тензор раздеформирования выражается через компоненты так называемой динамической матрицы $D_{jk}^{-1} \equiv c_{ijkl} n_l$ (см., например, [20,22])

$$\mathfrak{K}_{jklm} = D_{jk} n_l n_m. \quad (14)$$

Положительная определенность тензора (14) в этом случае непосредственно следует из устойчивости упругой подсистемы кристалла. Энергия „раздеформирования“, полученная подстановкой (14) в (12)

$$\Phi_{\text{dd}}^{\text{el}} \rightarrow \Phi_{\text{dd}}^{\text{destr}} = \frac{V}{2} \langle \sigma_{jl}^{\text{in}} n_l \rangle D_{jk} \langle \sigma_{km}^{\text{in}} n_m \rangle, \quad (15)$$

зависит, таким образом, от того, как именно ориентирован тензор внутренних напряжений по отношению к поверхности образца. В случае, если $\hat{\sigma}^{\text{in}} \mathbf{n} = 0$, вклад энергии „диполь-дипольных“ взаимодействий равен нулю, и однородное состояние соответствует минимуму полной энергии. Если же тензор внутренних напряжений ориентирован по отношению к поверхности „неправильным“ образом, то возникающая добавка (15) заведомо положительна.

Эта ситуация подобна той, что возникает в ферромагнетике при учете граничных условий для вектора намагниченности на его поверхности. Действительно, наличие нормальных (по отношению к поверхности образца) компонент вектора намагниченности эквивалентно появлению магнитных зарядов, создающих дальнедействующие поля размагничивания, энергия которых пропорциональна объему образца и потому может приводить к возникновению неоднородного состояния. Учитывая аналогию между функцией Грина упругой среды и функцией Грина оператора Лапласа, а также отмеченную в свое время еще де Витом аналогию между тензором упругих напряжений и вектором намагниченности, можно было бы без дальнейших вычислений утверждать, что энергия упругих „диполь-дипольных“ взаимодействий может быть понижена за счет образования доменной структуры. Представляется, однако, более физичным использовать другое доказательство, используя в качестве основной идеи те же соображения, что применялись для ферромагнитных кристаллах (см., например, [23]).

Итак, попытаемся найти такое неоднородное распределение первичного параметра порядка и вызванных им внутренних напряжений, которое бы соответствовало меньшей величине потенциала Гиббса, чем однородное. Предположим, что „пробное“ неоднородное состояние представляет собой периодическую (с периодом d_D) структуру, состоящую из доменов двух типов. Внутри каждого из доменов тензор $\hat{\sigma}^{\text{in}}$ принимает значение, соответствующее минимуму магнитной энергии, а границы раздела ориентированы таким образом, чтобы на них не возникали дополнительные напряжения, связанные с несовместностью спонтанных деформаций. В этом случае энергия кристалла может повыситься только за счет образования границ раздела и за счет полей деформации, создаваемых упругими диполями на поверхности кристалла (при отличных от нуля компонентах $\hat{\sigma}^{\text{in}} \mathbf{n}$). Легко показать, что поле деформаций отлично от нуля в основном в приповерхностном слое, толщина которого имеет тот же порядок величины, что и период d_D доменной структуры.¹⁰ Поскольку суммарная энергия границ раздела растет с уменьшением периода доменной структуры d_D , а энергия „диполь-дипольных“ взаимодействий уменьшается, существует оптимальный размер домена d_D^{opt} , при котором оба эти вклада становятся сравнимыми, а их сумма — минимальной. Очевидно, что если оптимальный период меньше характерных размеров образца L , то общее повышение энергии неоднородного состояния в d_D^{opt}/L раз меньше, чем пропорциональный объему кристалла вклад энергии „раздеформирования“ (15) однородного состояния.

¹⁰ Для упруго-изотропного материала это следует непосредственно из принципа Сен-Венана. В случае анизотропии характерный размер в направлении, перпендикулярном поверхности кристалла, определяется нулями детерминанта динамической матрицы и отличается от d_D коэффициентом, пропорциональным отношению модулей упругости.

Таким образом, для достаточно больших, но конечных образцов образование доменной структуры может оказаться энергетически выгодным. При этом, как и в случае ферромагнетика, условия формирования неоднородного состояния зависят не только от размеров, но и от формы кристалла.

4. В качестве примера приведем выражения для энергии раздеформирования легкоплоскостного антиферромагнетика, вырезанного в виде пластинки, нормаль к которой лежит в легкой плоскости $xу$ кристалла,¹¹

$$\Phi_{\text{dd}}^{\text{destr}} = \frac{1}{2} V \Lambda_{\text{eff}}^2 (l_x^2 - l_y^2)^2 \left[\frac{(n_x^2 - n_y^2)^2}{4c_{11}} + \frac{n_x^2 n_y^2}{c_{66}} \right], \quad (16)$$

где угловые скобки означают усреднение по объему V кристалла, а Λ_{eff} — эффективная константа магнитоупругости. Предполагается, что в бесконечном кристалле вектор антиферромагнетизма ориентирован вдоль оси Ox или Oy (что соответствует доменам x - и y -типа). Как видно из выражения (16), энергия раздеформирования существенным образом зависит от ориентации пластины по отношению к кристаллографическим осям. Поскольку при этом модуль сдвига c_{66} обычно меньше модуля c_{11} в 3–10 раз (см., например, [22]), значение энергии раздеформирования будет максимальным в случае, если плоскость пластины совпадает с плоскостью двойникования (т.е. с плоскостью доменной границы, $\mathbf{n} \parallel [110]$). Существенно меньшее значение энергии $\Phi_{\text{dd}}^{\text{destr}}$ получается, когда пластина вырезана перпендикулярно одной из легких осей для вектора антиферромагнетизма ($\mathbf{n} \parallel Ox$ или Oy).

Нелинейная (квадратичная) зависимость энергии раздеформирования (16) от усредненного по объему кристалла параметра порядка позволяет рассматривать относительную долю домена определенного типа как независимый внутренний термодинамический параметр,¹² сопряженный химическому потенциалу. При наличии внешних полей равновесное значение доли домена, определяющее характер доменной структуры (и такие макроскопические характеристики образца, как удлинение (стрикцию), магнетосопротивление, намагниченность и т.п.), можно вычислить из условий минимума потенциала Гиббса по отношению к этому параметру. Так, для рассматриваемого случая легкоплоскостного антиферромагнетика потенциал Гиббса во внешнем магнитном поле \mathbf{H} можно представить в виде

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_{\text{dd}}^{\text{destr}} - \frac{V}{2} \chi \langle [\mathbf{H}, \mathbf{I}]^2 \rangle, \quad (17)$$

где χ — магнитная восприимчивость, $\Phi_{\text{dd}}^{\text{destr}}$ определяется выражением (16), а Φ_0 — несущественная для данной задачи константа. Последнее слагаемое в (17),

¹¹ Примером такого кристалла могут служить высокотемпературные сверхпроводники, например слабодопированные системы $YBaCuO$ или $LaSrCuO$.

¹² При условии отличной от нуля подвижности междоменных границ.

которое фактически определяет разность химических потенциалов фаз во внешнем поле, является выражением для зеемановской энергии антиферромагнетика в полях, существенно меньших поля схлопывания подрешеток (подробнее см., например, [24]).

Минимизируя (17) по компонентам векторов антиферромагнетизма в обоих доменах и относительной доле ξ домена x -типа, получаем, что в поле, параллельном оси Ox , ξ уменьшается от значения $1/2$, соответствующего равновероятному распределению доменов в отсутствие поля, до нуля, что соответствует монодоменному состоянию

$$\xi = \begin{cases} 0.5(1 - H^2/H_{\text{MD}}^2), & H \leq H_{\text{MD}}, \\ 0, & H > H_{\text{MD}}. \end{cases} \quad (18)$$

Характерное поле монодоменизации

$$H_{\text{MD}} = \frac{\Lambda_{\text{eff}}}{\sqrt{\chi}} \sqrt{\frac{(n_x^2 - n_y^2)^2}{4c_{11}} + \frac{n_x^2 n_y^2}{c_{66}}}, \quad (19)$$

при котором невыгодный домен полностью выходит из образца, определяется значением магнитной восприимчивости χ и константы магнитоупругой связи Λ_{eff} . Как видно из формулы (19), величина H_{MD} существенно зависит от того, каким образом вырезан образец, и может меняться в пределах от нуля до величины, сравнимой с полем магнитострикции $\Lambda_{\text{eff}}/\sqrt{\chi c}$.

Следует заметить, что связь между формой образца и его доменной структурой на эмпирическом уровне использовалась при проведении экспериментов в антиферромагнетиком $LaSrCuO$ в работах [9,25]. В частности, для исследования эффекта памяти формы, связанного со смещением доменных границ, образец в виде тонкой пластины вырезался таким образом, чтобы его грани были перпендикулярны легким осям для вектора антиферромагнетизма, т.е. $\mathbf{n} \parallel Ox$ или Oy . При этом после нескольких циклов включения-выключения поля образец становился практически монодоменным в полях порядка 15 Т. В то же время при любой другой ориентации пластины, как отмечают авторы [9], эффект памяти не наблюдался (надо полагать, что приложенные поля оказались недостаточными для монодоменизации образца). В экспериментах, где требовалось сохранять равные доли доменов даже при наличии поля, пластину вырезали таким образом, чтобы ее грани были параллельны трудным направлениям для вектора антиферромагнетизма, т.е. $n_x = n_y$, что, по мнению авторов [25], препятствовало движению доменных границ (но, как видно, это просто снижало „восприимчивость“ магнитоупругой доменной структуры к внешнему магнитному полю). По существу подобное поведение образца полностью соответствует приведенной выше и описанной картине многодоменного антиферромагнитного образца с двумя типами доменов во внешнем магнитном поле.

5. Таким образом, можно утверждать, что поля упругих деформаций, возникающие при термоупругих фазовых переходах одновременно с первичным параметром

порядка, могут приводить к формированию доменной структуры в кристаллах конечных размеров со свободной поверхностью. В основе используемой модели лежит предположение о том, что фазовый переход сопровождается возникновением в каждой точке кристалла тензора внутренних напряжений, структура и величина которого определяется только термодинамическими свойствами упорядоченной фазы, а ориентация относительно кристаллографических осей жестко связана с ориентацией первичного параметра порядка (например, вектора антиферромагнетизма) и может меняться под действием внешних полей.

Формирование доменной структуры в образцах со свободной поверхностью обусловлено наличием на ней „упругих зарядов“. Эти „заряды“ создаются теми компонентами тензора внутренних напряжений которые имеют отличные от нуля проекции в направлении, перпендикулярном поверхности кристалла. Производимые в свою очередь этими зарядами дальнедействующие поля упругих деформаций аналогичны магнитоэластическим полям размагничивания в ферромагнитных кристаллах. Соответствующий вклад в энергию кристалла нелинейным образом зависит от относительной доли домена определенного типа и позволяет рассматривать ее как внутренний термодинамический параметр, сопряженный химическому потенциалу.

Необходимо сказать, что феноменологические модели, использующие квадратичную зависимость термодинамического потенциала от доли домена (хотя и полученные в рамках несколько других моделей), уже использовались ранее [17,18,26] для интерпретации температурной и полевой зависимости таких определяемых доменной структурой кристалла макроскопических характеристик антиферромагнетиков, как магнитоэластичность, магнетосопротивление и намагниченность. Полученное удовлетворительное согласие теоретических результатов с экспериментальными данными позволяет надеяться, что предложенный механизм формирования доменной структуры является доминирующим в антиферромагнетиках с сильным магнитоупругим взаимодействием и, возможно, в термоупругих мартенситах.

Безусловно, адекватность той или иной модели должна проверяться экспериментом. В качестве дополнительного теста можно было бы предложить измерить задаваемую соотношением (19) зависимость поля монодоменизации от формы образца, а также проверить предсказываемое моделью наличие критического размера образца $L_{\text{crit}} \approx d_{\text{D}}^{\text{opt}}$ (толщины пластины), при котором доменная структура возникнуть не может.

Авторы благодарят В.Г. Барьяхтара, Е.Д. Белоколоаса и С.М. Рябченко за плодотворные дискуссии и критические замечания, послужившие стимулом для постановки соответствующей задачи. Е.В.Г. благодарит также А.А. Малышенко за финансовую и техническую поддержку при выполнении данной работы.

Список литературы

- [1] T. Yamada. J. Phys. Soc. Japan **21**, 4, 650 (1966).
- [2] M. Safa, B.K. Tanner. Phil. Mag. B **37**, 6, 739 (1978).
- [3] G.F. Clark, B.K. Tanner. Phys. Stat. Sol. (a) **59**, 1, 241 (1980).
- [4] T. Hatanaka, A. Sawada. Jpn J. Appl. Phys. P.2. Lett. **28**, 3, L794 (1989).
- [5] K. Ullakko, J.K. Huang, C. Kantner, R.C. O'Handley, V.V. Kokorin. Appl. Phys. Lett. **69**, 13, 1966 (1996).
- [6] Е.В. Амитин, А.Г. Байкалов, А.Г. Блинов, Л.А. Боярский, В.Я. Диковский, К.Р. Жданов, М.Ю. Каменев, Л.П. Козеева, Л.П. Шелковников. Письма в ЖЭТФ **70**, 5, 350 (1999).
- [7] A.N. Lavrov, Y. Ando, K. Segawa, J. Takeya. Phys. Rev. Lett. **83**, 7, 1419 (1999).
- [8] В.М. Калига, А.Ф. Лозенко, С.М. Рябченко. ФНТ **26**, 7, 671 (2000).
- [9] A.N. Lavrov, S. Komiyu, Y. Ando. Nature **418**, 385 (2002).
- [10] N.B. Weber, H. Ohldag, H. Gomonaj, F.U. Hillebrecht. Phys. Rev. Lett. **91**, 23, 237305 (2003).
- [11] Y.Y. Li. Phys. Rev. **101**, 5, 1450 (1956).
- [12] D.S. Lieberman, M.S. Wechsler, T.A. Read. J. Appl. Phys. **26**, 4, 473 (1955).
- [13] B. Horovitz, G.R. Barsch, J.A. Krumhansl. Phys. Rev. B **43**, 1, 1021 (1991).
- [14] A.L. Roytburd. J. Appl. Phys. **83**, 1, 228 (1998).
- [15] M. Kléman, M. Schlenker. J. Appl. Phys. **43**, 7, 3184 (1972).
- [16] M. Kléman. J. Appl. Phys. **45**, 3, 1377 (1974).
- [17] E. Gomonay, V.M. Loktev. Phys. Rev. B **64**, 6, 064406(6) (2001).
- [18] E. Gomonay, V.M. Loktev. J. Phys.: Cond. Matt. **14**, 15, 3959 (2002).
- [19] M. Kléman. In: Dislocations in solids / Ed. F.R. Nabarro. NH, Amsterdam (1980). Vol. 7. Ch. 24. P. 351.
- [20] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985). 352 с.
- [21] R. de Wit. Int. J. Eng. Sci. **19**, 12, 1475 (1981).
- [22] А.Г. Хачатурян. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. Наука, М. (1974). 384 с.
- [23] Ch. Kittel. Rev. Mod. Phys. **21**, 3, 541 (1949).
- [24] В.Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов, М.В. Четкин. УФН **146**, 3, 417 (1985).
- [25] Y. Ando, A.N. Lavrov, S. Komiyu. Phys. Rev. Lett. **90**, 24, 247003 (2003).
- [26] В.М. Калига, А.Ф. Лозенко, П.А. Троценко, Т.М. Яткевич. ФНТ **30**, 1, 38 (2004).