

10. Carrol P.K., Kennedy E.T. // Phys. Rev. Lett. 1977. **38**. P. 1068.  
 11. Балаиов В.В., Липовецкий С.С., Павличенков А.В. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1971. № 1. С. 65 (Moscow University Phys. Bull. 1971. No. 1. P. 48).  
 12. Балаиов В.В., Гришанова С.И., Круглова И.М., Сенаиенко В.С. // Опт. и спектр. 1970. **28**. С. 859.  
 13. Kheifets A.S. // J. Phys. B. 1993. **26**. P. 2053.  
 14. Ho Y.K. // Phys. Rev. 1981. **A23**. P. 2137.  
 15. Bhatia A.K., Temkin A. // Phys. Rev. 1975. **A11**. P. 2018.  
 16. Bhatia A.K., Temkin A. // Phys. Rev. 1984. **A29**. P. 1895.  
 17. Oza H.D. // Phys. Rev. 1986. **A33**. P. 824.  
 18. Macias A., Martin F., Riera A., Yanez M. // Phys. Rev. 1987. **A36**. P. 4187.  
 19. Bachau H., Bahri M., Martin F., Salin A.J. // J. Phys. B. 1991. **24**. P. 2015.  
 20. Brage T., Froese Fisher C., Miecznik G. // J. Phys. B. 1992. **25**. P. 5289.  
 21. Новиков Н.В., Сенаиенко В.С. // Опт. и спектр. 1999. **86**. С. 371.  
 22. Burke P.G. // Adv. At. Mol. Phys. 1968. **4**. P. 173.

Поступила в редакцию  
18.02.00

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.1

### ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ И АНОМАЛИИ УПРУГИХ КОНСТАНТ ВАНАДАТА $\text{TmVO}_4$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

З. А. Казей, Н. П. Колмакова, О. А. Шишкина

(кафедра общей физики для естественных факультетов)

На основе реального энергетического спектра и волновых функций иона  $\text{Tm}$  в кристаллическом поле ванадата проведены расчеты всех деформационных восприимчивостей и  $\Delta E$ -эффекта. Получено хорошее описание экспериментальных упругих констант  $C^\delta(T)$  и  $C^\gamma(T)$  и их изменения в магнитном поле в тетрагональной и ромбической фазах. Определены магнитоупругие  $B^\delta$ ,  $B^\gamma$  и парные квадрупольные  $K^\delta$ ,  $K^\gamma$  коэффициенты. Исследовано влияние магнитного поля, ориентированного вдоль различных симметричных направлений в кристалле, на квадрупольное упорядочение в ванадате  $\text{TmVO}_4$ .

1. Редкоземельные (РЗ) парамагнетики с тетрагональной структурой циркона  $\text{RXO}_4$  ( $X = \text{P}, \text{V}$ ; пространственная группа  $D_{4h}^{19} = I4_1/amd$ ) являются идеальными объектами для исследования эффектов, обусловленных квадрупольными взаимодействиями, например спонтанных и стимулированных магнитным полем структурных фазовых переходов ян-теллеровской природы — квадрупольного упорядочения [1]. Комплексные исследования этих соединений в рамках формализмов кристаллического поля (КП) и обобщенных восприимчивостей позволяют разделить эффекты, обусловленные особенностями электронной структуры РЗ-иона и матрицы, и описать поведение всего семейства РЗ-цирконов в целом. Такие исследования были проведены нами для серии РЗ-фосфатов [2] и для ванадатов Tb, Dy и Ho [3]. Соединение  $\text{TmVO}_4$  занимает особое место в ряду РЗ-цирконов, так как для иона  $\text{Tm}^{3+}$  в матрице ванадата нижним в спектре является орбитальный дублет, для которого реализуется классический эффект Яна–Теллера. Кроме того, для  $\text{TmVO}_4$  взаимодействия электронов, находящихся на вырожденном уровне, с  $\gamma$ - и  $\delta$ -деформационными модами (в других обозначениях  $B_{1g}$ - и  $B_{2g}$ -моды) сравнимы по величине, что обуславливает специфику этого соединения.

В настоящей работе рассчитаны температурные и полевые зависимости всех допустимых симметрий кристалла деформационных восприимчивостей  $\chi_\mu(T, H)$  для  $\text{TmVO}_4$  на основе реального энергетического спектра и волновых функций иона  $\text{Tm}^{3+}$ ,

формируемых КП. Зависимости  $\chi_\mu(T, H)$ , определяемые электронной структурой РЗ-иона, являются существенными характеристиками соединения. Они позволяют предсказать наличие квадрупольного упорядочения в системе, определить критические параметры этого фазового перехода, рассчитать магнитоупругий вклад в упругие константы и влияние на них магнитного поля.

2. Для расчета вклада РЗ-иона в температурные и полевые ( $\Delta E$ -эффект) зависимости упругих констант в тетрагональной и ромбической фазах используем гамильтониан  $H = H_{\text{CF}} + H_Z + H_{\text{ME}} + H_Q$ , описывающий взаимодействие с КП ( $H_{\text{CF}}$ ), зеемановское взаимодействие магнитного момента  $\mathbf{J}$  с внешним полем  $\mathbf{H}$  ( $H_Z$ ), одноионное магнитоупругое ( $H_{\text{ME}}$ ) и парное квадрупольное ( $H_Q$ ) взаимодействия, записанные через операторы Стевенса  $O_n^m$  и симметризованные деформации  $\varepsilon^\mu$  в квадрупольном приближении и в приближении молекулярного поля [2]:

$$H_{\text{CF}} = \alpha_J B_2^0 O_2^0 + \beta_J (B_4^0 O_4^0 + B_4^4 O_4^4) + \gamma_J (B_6^0 O_6^0 + B_6^4 O_6^4),$$

$$H_Z = g_J \mu_B \mathbf{JH},$$

$$H_{\text{ME}} = -\alpha_J [(B^{\alpha 1} \varepsilon^{\alpha 1} + B^{\alpha 2} \varepsilon^{\alpha 2}) O_2^0 + B^\gamma \varepsilon^\gamma O_2^2 + B^\delta \varepsilon^\delta P_{xy} + B^\varepsilon (\varepsilon_1^\varepsilon P_{zx} + \varepsilon_2^\varepsilon P_{zy})],$$

$$H_Q = -\alpha_J^2 [K^\alpha \langle O_2^0 \rangle O_2^0 + K^\gamma \langle O_2^2 \rangle O_2^2 +$$

$$+ K^\delta \langle P_{xy} \rangle P_{xy} + K^\varepsilon (\langle P_{zx} \rangle P_{zx} + \langle P_{zy} \rangle P_{zy})] \\ (P_{ij} = \frac{1}{2} (J_i J_j + J_j J_i)).$$

В этих выражениях  $\alpha_J, \beta_J, \gamma_J$  — параметры Стевенса,  $B_n^m$  — параметры КП,  $B^\mu$  и  $K^\mu$  — магнитоупругие и парные квадрупольные коэффициенты, описывающие взаимодействие с различными деформационными модами  $\varepsilon^\mu$  ( $\mu = \alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon$ ).

Гамильтонианы  $H_{ME}$  и  $H_Q$  приводятся к обобщенному квадрупольному гамильтониану  $H_{QT} = H_Q + H_{ME}$ :

$$H_{QT} = -\alpha_J^2 [G^\alpha \langle O_2^0 \rangle O_2^0 + G^\gamma \langle O_2^2 \rangle O_2^2 + \\ + G^\delta \langle P_{xy} \rangle P_{xy} + G^\varepsilon (\langle P_{zx} \rangle P_{zx} + \langle P_{zy} \rangle P_{zy})],$$

где полные квадрупольные константы  $G^\mu = G_{ME}^\mu + K^\mu = (B^\mu)^2 / C_0^\mu + K^\mu$  имеют вклад как от одноионного магнитоупругого, так и от парного квадрупольного взаимодействий ( $C_0^\mu$  — базовая упругая константа в отсутствие взаимодействий).

Влияние магнитоупругого и парного квадрупольного взаимодействий на упругие константы при наличии магнитного поля и в его отсутствие рассчитано в формализме деформационных восприимчивостей, а спектр и волновые функции РЗ-иона в поле получены путем численного решения секулярного уравнения для гамильтониана  $H_0 = H_{CF} + H_Z + H_{QT}$ . Вычисляя упругую константу  $C^\mu$  как вторую производную потенциала Гиббса по деформации  $\varepsilon^\mu$ , получаем выражение для вклада магнитоупругих взаимодействий в  $C^\mu$  и  $\Delta E$ -эффект:

$$C^\mu(T, H) = C_0^\mu - (B^\mu)^2 \frac{\chi_\mu(T, H)}{1 - K^\mu \chi_\mu(T, H)} \quad (\mu = \gamma, \delta, \varepsilon),$$

где деформационные восприимчивости  $\chi_\mu(T, H)$  определяются электронной структурой РЗ-иона [3]. Расчеты электронной структуры для ромбической фазы проводились с учетом гамильтониана  $H_{QT}$ , в котором параметр порядка  $\langle P_{xy} \rangle$  меняется с температурой. Квадрупольные взаимодействия при значительных величинах параметров  $B^\mu$  и  $K^\mu$  могут обуславливать обращение в нуль соответствующей упругой константы  $C^\mu$ , т.е. структурный фазовый переход ферродисторсионного типа. Условием такого перехода является достаточно большая величина  $\chi_\mu$ , удовлетворяющая соотношению  $1/\chi_\mu \leq G^\mu$ .

3. Спектроскопические данные для иона  $Tm^{3+}$  в матрице ванадата имеются только для легированного соединения  $YVO_4 : Tm$ , а параметры его КП неизвестны. Поэтому мы использовали в своих расчетах параметры КП ванадата  $HoVO_4$  [4], которые дают очень близкие к эксперименту расстояние  $\Delta = 47,2 \text{ см}^{-1}$  между нижними дублетом и синглетом и фактор расщепления нижнего дублета  $g_z = 10,05$ , а также позволяют хорошо описать экспериментальные магнитоупругие аномалии. На основе этих параметров были рассчитаны все деформационные восприимчивости  $\chi_\mu(T)$  кристалла  $TmVO_4$ , показанные на рис. 1.

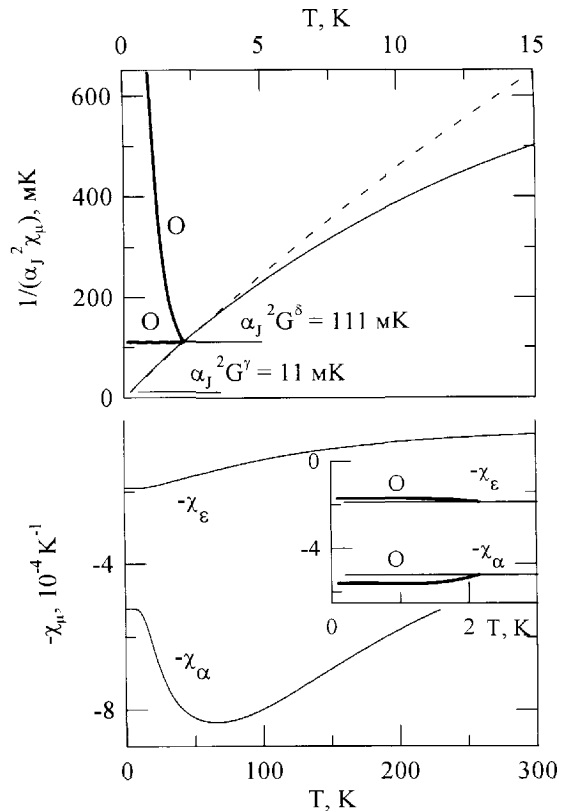


Рис. 1. Рассчитанные температурные зависимости деформационных восприимчивостей  $-\chi_\alpha$  и  $-\chi_\varepsilon$  (внизу) и  $1/\chi_\gamma$  (вверху, штриховая линия),  $1/\chi_\delta$  (сплошная линия) ванадата Tm в тетрагональной и орторомбической (кривые O) фазах

Видно, что полносимметричная восприимчивость  $\chi_\alpha$  достаточно велика и ее характерная температурная зависимость с экстремумом (рис. 1, внизу) аналогична наблюдаемым ранее для РЗ-фосфатов [5] и ванадатов Tb, Dy, Ho [3]. Восприимчивость  $\chi^\varepsilon$ , определяющая поведение упругой константы  $C^\varepsilon = 2c_{44}$ , в несколько раз меньше и монотонно меняется с температурой. Возникновение квадрупольного упорядочения в  $TmVO_4$  сопровождается характерными аномалиями на зависимостях  $-\chi_\alpha(T)$  и  $-\chi_\varepsilon(T)$  (кривые O на вставке).

Восприимчивости ромбической симметрии  $\chi_\delta$  и  $\chi_\gamma$  в  $TmVO_4$  достаточно велики и сравнимы по величине (рис. 1, вверху). Зависимости  $1/\chi_\delta(T)$  и  $1/\chi_\gamma(T)$  линейны вплоть до температур  $\sim 5-7$  К, в отличие от кривых  $1/\chi_\mu(T)$  для ванадатов Tb, Dy, Ho, обнаруживающих экстремум или плато при низких температурах. В РЗ-цирконах из-за малой величины базовой упругой константы  $C_0^\delta$  ( $C_0^\delta \approx C_0^\gamma / 5$ ) величина полной квадрупольной константы  $G^\delta$  существенно больше, чем  $G^\gamma$ . Поэтому для сравнимых значений  $\chi_\delta$  и  $\chi_\gamma$  в  $TmVO_4$  реализуется структурный фазовый переход  $\delta$ -симметрии при температуре  $T_c = 2,15$  К, определяемой условием  $\alpha_J^2 / \chi_\delta(T_c) = \alpha_J^2 G^\delta \approx 111$  мК (см. далее), что совпадает с экспериментальным значением. Эта же критическая температура получается при расчете параметра порядка фазового перехода  $\langle P_{xy} \rangle$  с ромбическим параметром КП  $B_2^2 = -\alpha_J G^\delta \langle P_{xy} \rangle$  ( $B_2^2(0 \text{ К}) = -25,4$  К).

В отсутствие этого перехода деформация  $\gamma$ -симметрии имела бы место при температуре  $T_{c2} = 0,2$  К, определяемой константой  $\alpha_J^2 G^\gamma \approx 11$  мК (см. далее). Возникновение квадрупольного упорядочения и соответствующее изменение в спектре иона  $\text{Tm}^{3+}$  сопровождаются резким уменьшением деформационной восприимчивости  $\chi_\delta$  и выходом  $\chi_\gamma$  на плато в ортофазе (кривые *O* на рис. 1,верху). Характерной особенностью зависимостей  $\chi_\delta(T)$  и  $\chi_\gamma(T)$  для  $\text{TmVO}_4$ , обусловленной орбитальным вырождением основного дублета в тетрафазе, является их расходимость при низких температурах. Это означает, что при любом значении параметра взаимодействия  $G^\delta(x) = G^\delta(x=1)x$  ( $x$  — концентрации ионов  $\text{Tm}^{3+}$ ) в системе  $\text{Tm}_x\text{Y}_{1-x}\text{VO}_4$  будет выполнено условие для структурного фазового перехода  $1/\chi_\delta(T_c(x)) = G^\delta(x)$  и критическая температура  $T_c(x)$  падает практически линейно при уменьшении  $x$  вплоть до критической концентрации  $x_c = 0$ .

Расчитанные зависимости  $\chi_\mu(T)$  позволяют описать anomальное поведение упругих констант  $C^\delta = 2c_{66}$  и  $C^\gamma = (c_{11} - c_{12})$  (рис. 2), измеренных акустическим методом (см. обзор [6]), и определить независимым образом магнитоупругий  $B^\mu$  и парный квадрупольный  $K^\mu$  коэффициенты. Так же как и ранее для ванадатов Tb, Dy и Ho, фононный вклад в  $C^\mu(T)$  аппроксимировался линейной зависимостью с коэффициентом  $(dC^\mu/dT)/C^\mu \approx 10^{-4}$  1/К в температурном диапазоне от 300 до 50 К и полагался нулевым при  $T < 50$  К. Отметим, что для ванадата  $\text{TmVO}_4$ , у которого наблюдается большой магнитоупругий вклад в упругие константы  $C^\delta$  и  $C^\gamma$ , неопределенность фононного вклада не приводит к существенным ошибкам. Наилучшее описание эксперимента в тетрафазе получается при использовании параметров  $B^\delta = 18,6 \cdot 10^3$  К,  $\alpha_J^2 K^\delta = -50$  мК,  $C_0^\delta = 2,18 \cdot 10^5$  К для  $\delta$ -моды и  $B^\gamma = 14,3 \cdot 10^3$  К,  $\alpha_J^2 K^\gamma = -5,8$  мК,  $C_0^\gamma = 11,95 \cdot 10^5$  К для  $\gamma$ -моды. При этом получаются следующие значения

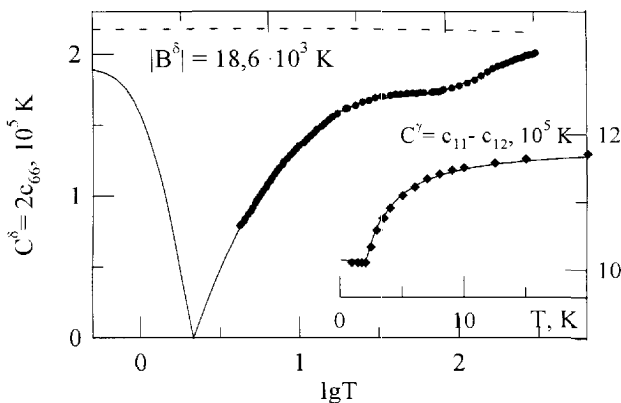


Рис. 2. Экспериментальные (точки) и рассчитанные с указанными параметрами (кривые) температурные зависимости упругой моды  $C^\delta$  ( $C_0^\delta = 2,18 \cdot 10^5$  К,  $\alpha_J^2 K^\delta = -50$  мК) кристалла  $\text{TmVO}_4$ . На вставке показаны экспериментальные и рассчитанные зависимости упругой моды  $C^\gamma$  ( $C_0^\gamma = 11,95 \cdot 10^5$  К,  $B^\gamma = 14,3 \cdot 10^3$  К,  $\alpha_J^2 K^\gamma = -5,8$  мК)

полных квадрупольных констант:  $\alpha_J^2 G^\delta = 111$  мК и  $\alpha_J^2 G^\gamma = 11$  мК. При сравнимых значениях магнитоупругих коэффициентов  $B^\delta$  и  $B^\gamma$  значение квадрупольной константы для  $\delta$ -моды оказывается на порядок больше из-за малой величины упругой константы  $C_0^\delta$ . Отношение  $K^\mu/G_{\text{ME}}^\mu$  для обеих мод при данных наборах параметров близко к теоретическому значению (1/3), которое имеет место в отсутствие вклада оптических фононов.

4. Было рассчитано также влияние поля различной симметрии на фазовый переход и деформационные восприимчивости  $\chi_\mu(T, H)$  в  $\text{TmVO}_4$ , что дает возможность проанализировать  $\Delta E$ -эффект  $\Delta C^\mu(H)/C^\mu(0)$  (рис. 3). В расчетах  $\Delta E$ -эффекта использовались коэффициенты, определенные ранее при описании температурных зависимостей  $C^\delta(T)$  и  $C^\gamma(T)$ . При этом без каких-либо дополнительных подгоночных параметров были получены очень близкие к экспериментальным значения критической температуры  $T_c$  и критического поля  $H_c(T)$ , при которых разрушается квадрупольное упорядочение.

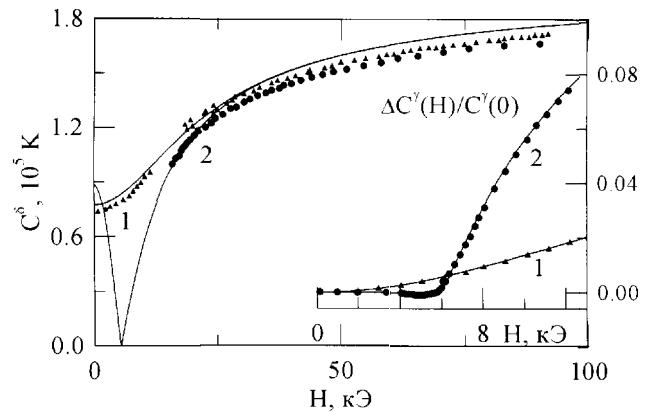


Рис. 3. Экспериментальные (точки:  $T = 4,2$  (1) и  $1,5$  К (2)) и рассчитанные с указанными параметрами (кривые) полевые зависимости упругой моды  $C^\delta$  кристалла  $\text{TmVO}_4$ . На вставке показаны экспериментальные (точки:  $T = 4,2$  (1) и  $1,5$  К (2)) и рассчитанные (кривые) зависимости упругой моды  $C^\gamma$  ( $H_{\text{dmg}} = 0,70$  кЭ для  $T = 1,5$  К)

Прежде всего, было исследовано влияние поля, направленного вдоль оси [001], для которого  $g$ -фактор максимален. Это влияние достаточно подробно изучалось ранее в рамках псевдоспинового формализма. Для  $\delta$ -моды  $\Delta E$ -эффект при  $T = 4,2$  К  $> T_c$  положительный, монотонный и при  $H = 100$  кЭ составляет  $\Delta C^\delta/C^\delta \approx 1,4$ . Для  $T = 1,5$  К  $< T_c$  на рассчитанной зависимости  $C^\delta(H)$  имеется глубокий минимум при  $H_c(T) = 5,3$  кЭ, соответствующий обращению в нуль упругой константы  $C^\delta(H)$  при обратном переходе из орто- в тетрафазу. Этот участок слабых полей недоступен для измерения упругих констант, по-видимому, из-за большого поглощения звука при переориентации ян-теллеровских доменов. В полях в 3–5 раз выше критического изотермы  $C^\delta(H)$  для 4,2 и 1,5 К в соответствии с экспериментом практически совпадают. Для упругой константы  $C^\gamma(H)$  эффект почти на порядок меньше, а критическое поле  $H_c(T)$  проявляется в виде излома на кривых  $C^\gamma(H)$  при  $T < T_c$ . При сравнении с экспериментом следует учи-

тывать влияние размагничивающего поля, которое для  $T = 1,5$  К и  $H \approx 6$  кЭ составляет  $H_{\text{dmg}} \approx 0,7$  кЭ.

Влияние поля, направленного вдоль осей [110] и [100], на квадрупольное упорядочение и упругие свойства  $\text{TmVO}_4$  мало исследовано и с экспериментальной, и с теоретической точек зрения. Поскольку значения  $g$ -фактора в базисной плоскости существенно меньше, чем вдоль оси [001] ( $g_x \sim 0,1g_z$ ), для достижения сравнимого эффекта нужны более сильные поля. В сильных полях уже существен вклад от возбужденных уровней, и анализ следует проводить на основе реального спектра иона  $\text{Tm}^{3+}$ . Поле, направленное вдоль оси [110], индуцирует деформацию той же симметрии, что и спонтанная, и влияет прежде всего на параметр порядка и доменную структуру образца при  $T < T_c$ . Поле увеличивает параметр порядка в «выгодном» (с максимальным значением  $g$ -фактора вдоль поля) домене и уменьшает его в «невыгодном». Расчеты с реальными параметрами взаимодействия показывают, что решение для гамильтониана с «невыгодным» доменом существует вплоть до полей порядка 25 кЭ, т.е. в полях выше этого образец неизбежно должен находиться в монокристаллическом состоянии. Отметим, однако, что на процессы переориентации доменов в реальных кристаллах оказывают сильное влияние такие факторы, как механические напряжения и дефекты в кристалле [7]. Для обеих констант ( $C^\delta$  и  $C^\gamma$ )  $\Delta E$ -эффект при  $T = 1,5$  К  $< T_c$  положителен, монотонен и в поле 100 кЭ достигает величины  $\sim 1,0$  и  $\sim 0,11$  соответственно (рис. 4, сверху). При температурах выше  $T_c$  величина эффекта резко уменьшается.

Более сложное поведение наблюдается в поле  $H \parallel [100]$ , имеющем иную симметрию, чем параметр порядка. В ромбической фазе кристалла для температур в окрестности  $T_c$  параметр порядка  $\langle P_{xy} \rangle$  увеличивается по мере роста поля вплоть до  $\sim 40$  кЭ. Далее так же, как и в поле вдоль оси [001], квадрупольное упорядочение (параметр порядка  $\langle P_{xy} \rangle$ ) подавляется, однако величина критического поля  $H_{c2} \approx 87$  кЭ почти на порядок больше. В соответствии с этим упругая константа  $C^\delta(H)$  уменьшается при росте поля вплоть до  $H_{c2}$ , где она обращается в нуль (рис. 4, внизу). Упругая константа  $C^\gamma(H)$  растет при возрастании поля, и величина эффекта для  $H = 100$  кЭ составляет  $\sim 0,15$ , а критическое поле проявляется в виде излома на зависимости  $C^\gamma(H)$ .

Интересно, что при  $T \gtrsim T_c$  поле  $H \parallel [100]$  индуцирует квадрупольно упорядоченную фазу, которая существует в ограниченном интервале полей. Таким образом, поле вдоль оси [100] повышает температуру перехода, и фазовая диаграмма  $H_{c2}(T)$  в этом случае более сложная, чем для  $H \parallel [001]$  (вставка на рис. 4). Этот эффект по сути аналогичен стимулированному эффекту Яна–Теллера в виртуальном эластике  $\text{TmPO}_4$  в поле  $H \parallel [100]$  [8]. Повышение критической температуры невелико ( $\Delta T_c < 0,1$  К) и, по-видимому, сильно зависит от реального спектра и волновых функций иона  $\text{Tm}^{3+}$ , формируемых КП.

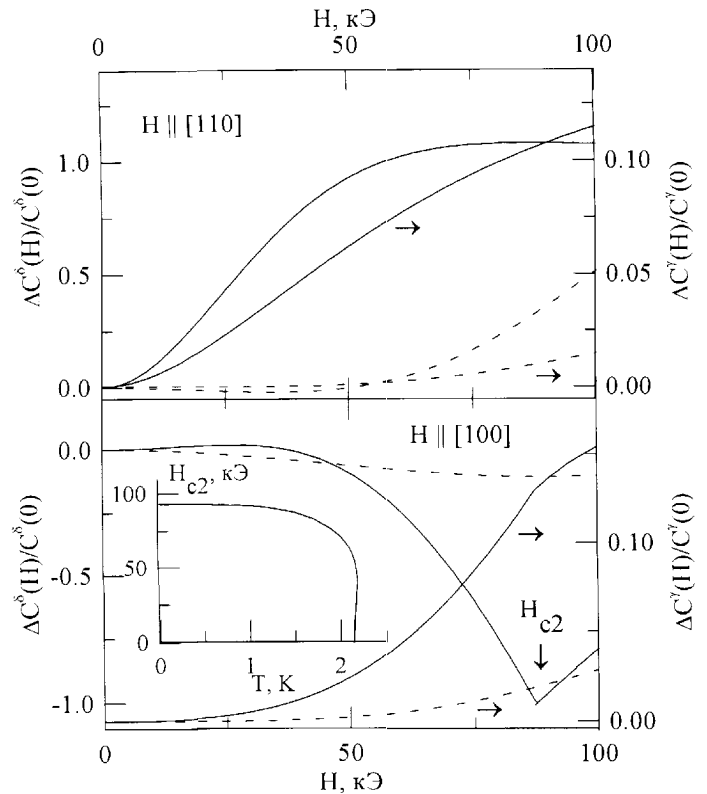


Рис. 4. Рассчитанные полевые зависимости упругих констант  $\Delta C^\delta(H)/C^\delta(0)$  и  $\Delta C^\gamma(H)/C^\gamma(0)$  ( $\Delta E$ -эффект) кристалла  $\text{TmVO}_4$  для ориентации поля вдоль осей [110] (вверху) и [100] (внизу) при  $T = 1,5$  К  $< T_c$  (сплошные линии) и  $T = 4,2$  К  $> T_c$  (штриховые линии). На вставке показана рассчитанная фазовая диаграмма  $H_{c2}(T)$  для поля вдоль оси [100], подавляющего квадрупольное упорядочение

5. Проведенные исследования позволяют установить и проанализировать изменение параметров взаимодействия для серии ванадатов  $\text{RVO}_4$  (таблица). Значения магнитоупругих коэффициентов  $B^\gamma$  и  $B^\delta$  для ванадатов Tb, Dy, Ho и Tm сравнимы по величине и примерно в 1,5 раза выше, чем известные для фосфатов [2], а  $B^\delta$  оказывается несколько выше  $B^\gamma$ . При этом как одноионные магнитоупругие ( $G_{\text{ME}}^\mu$ ), так и парные квадрупольные ( $K^\mu$ ) вклады для  $\delta$ -моды почти на порядок больше, чем для  $\gamma$ -моды. Значения базовой константы  $C_0^\gamma$  лежат в диапазоне  $(9,6 \div 12) \cdot 10^5$  К, а  $C_0^\delta$  — в диапазоне  $(1,7 \div 2,2) \cdot 10^5$  К, т.е. они близки к используемым в литературе средним значениям. Соотношение  $K^\mu/G_{\text{ME}}^\mu = -1/3$  достаточно хорошо выполняется для мягких упругих мод в  $\text{TbVO}_4$  и  $\text{TmVO}_4$  и несколько хуже в  $\text{HoVO}_4$ , а для  $\text{DyVO}_4$  с учетом различных наборов параметров  $B^\mu$  и  $K^\mu$  лежит в пределах от  $-0,20$  до  $0,40$ . Эти результаты согласуются с данными обзора [6]. Таким образом, расчеты деформационных восприимчивостей  $\chi_\mu(T, H)$ , проведенные на основе реального энергетического спектра и волновых функций РЗ-иона, позволили проанализировать квадрупольное упорядочение в ванадатах Tb, Dy, Ho, Tm, получить хорошее описание экспериментальных упругих констант и  $\Delta E$ -эффекта в тетрагональной и ромбической фазах. Определенные из сравнения с экспериментом магнитоупругие коэффициенты  $B^\delta$ ,  $B^\gamma$  мало

Базовые упругие константы  $C_0^\mu$ , магнитоупругие коэффициенты  $B^\mu$ ,  
одноионные магнитоупругие  $\alpha_J^2 G_{ME}^\mu$  и парные квадрупольные  $\alpha_J^2 K^\mu$   
вклады в полный квадрупольный коэффициент  $\alpha_J^2 G^\mu$   
для магнитоупругих мод  $\gamma$ -,  $\delta$ -,  $\varepsilon$ -симметрии в РЗ-ванадатах

| РЗ-ванадаты       | Мода          | $C_0^\mu$ ,<br>10 <sup>5</sup> К | $B^\mu$ ,<br>10 <sup>3</sup> К | $\alpha_J^2 G_{ME}^\mu$ ,<br>мК | $\alpha_J^2 K^\mu$ ,<br>мК | $\alpha_J^2 G^\mu$ ,<br>мК | $K^\mu / G_{ME}^\mu$ |
|-------------------|---------------|----------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------|
| TbVO <sub>4</sub> | $\delta$      | 1,73                             | 18,3                           | 197                             | -59                        | 138                        | -0,30                |
| DyVO <sub>4</sub> | $\gamma$      | 12,0                             | 15,1                           | 7,6                             | -1,5                       | 6,1                        | -0,20                |
| HoVO <sub>4</sub> | $\gamma^*$ )  | 9,6                              | 15                             | 1,19                            | -0,3                       | 1,16                       | -0,25                |
| TmVO <sub>4</sub> | $\varepsilon$ | 5,71                             | 6,4                            |                                 |                            |                            |                      |
|                   | $\delta$      | 2,18                             | 18,6                           | 161                             | -50                        | 111                        | -0,31                |
|                   | $\gamma$      | 11,95                            | 14,3                           | 16,8                            | -5,8                       | 11                         | -0,35                |

\*) Данные из работы [2].

меняются по величине в пределах РЗ-ряда ванадатов и являются характеристиками серии в целом.

#### Литература

1. Gehring G.A., Gehring K.A. // Rep. Progr. Phys. 1975. **38**, No. 1. P. 1.
2. Morin P., Kazei Z. // J. Phys.: Condens. Matter. 1999. **11**, No. 4. P. 1289.
3. Казей З.А., Колмакова Н.П., Шишкина О.А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 3. С. 33 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 3, P. 34).

4. Bleaney B., Gregg J.F., Hansen P. et al. // Proc. Roy. Soc. (Lond.). 1988. **A416**, No. 1850. P. 63.
5. Соколов В.И., Казей З.А., Колмакова Н.П., Соловьянова Т.В. // ЖЭТФ. 1991. **99**, № 3. С. 945.
6. Melcher R.L. // Physical Acoustics. Vol. XII / Ed. W.P. Mason, R.N. Thurston. N. Y.: Academic Press, 1976.
7. Казей З.А. // ФТТ. 1998. **40**, № 4. С. 701.
8. Morin P., Kazei Z. // Phys. Rev. 1997. **B55**, No. 14. P. 8887.

Поступила в редакцию  
05.01.00

УДК 537.226.33

## ТЕПЛОЕМКОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ВБЛИЗИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВТОРОГО РОДА

С. В. Павлов, О. Ю. Полякова

(кафедра общей физики для естественных факультетов)

В рамках феноменологической модели Ландау для тонких пленок одноосных сегнетоэлектриков исследованы зависимости теплоемкости от температуры и толщины вблизи фазового перехода второго рода. Обнаружено, что при уменьшении толщины тонкой пленки скачок теплоемкости уменьшается, размывается и смещается в сторону более низких температур. При определенной толщине тонкой пленки аномалия теплоемкости исчезает (в частности, для триглицинульфата — при толщине в несколько нанометров).

#### Введение

Теоретические исследования фазовых переходов, а также сегнетоэлектрических и магнитных явлений все чаще проводятся с помощью модельных объектов, в которых по возможности учитываются свойства реальных материалов, известные из эксперимента. На характеристики реальных объектов влияют примеси, облучение, различного рода дефекты (в частности, дислокации, двойникование), наличие доменной структуры, а также конечные размеры исследуемого образца.

Особый интерес представляют тонкопленочные структуры. Магнитные тонкие пленки давно используются в элементах памяти ЭВМ, в различных устройствах хранения, обработки и передачи информации. В последнее десятилетие и сегнетоэлектрические пленки рассматриваются как перспективный ма-

териал, эффективно работающий в элементах памяти ЭВМ.

Развитие феноменологической теории фазовых переходов в тонких ферромагнитных пленках впервые проведено в работе [1]. В этой работе обоснована необходимость учета поверхностной энергии, рассчитан профиль намагниченности, а также теоретически исследована зависимость температуры фазового перехода от толщины пленки.

Позднее, в 1979 г., была опубликована работа [2], в которой теория Ландау фазовых переходов II рода применена к случаю тонких пленок сегнетоэлектриков. В феноменологической модели [2] учитывается пространственная неоднородность спонтанной поляризации и влияние границ.

В большинстве работ, посвященных тонким пленкам сегнетоэлектриков, приводятся в основном ре-