

УДК 537.9

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

© 2019 г. С. В. Павлов*

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия

*E-mail: swcusp@mail.ru

Поступила в редакцию 16.12.2018 г.

После доработки 25.02.2019 г.

Принята к публикации 27.08.2019 г.

Предложена феноменологическая модель последовательности фазовых переходов в интерметаллидах RCo_2 , ($R = Gd, Tb, Nd, Ho, Er, Sm$), построенная методами теории катастроф. В рамках данной модели рассчитаны температурная зависимость аномальной части теплоемкости и полевые зависимости намагниченности вблизи температуры фазового перехода. Сопоставление с экспериментальными данными показало удовлетворительное качественное соответствие.

DOI: 10.1134/S0367676519120202

Редкоземельные интерметаллиды RCo_2 , ($R = Gd, Tb, Nd, Ho, Er, Sm$) кристаллизуются в кубическую структуру с пространственной группой симметрии $Fd\bar{3}m$ [1]. Большинство этих соединений обладают магнитными свойствами и испытывают последовательность структурных фазовых переходов из кубической сингонии в тетрагональную, а затем в орторомбическую. Фазовые переходы в тетрагональную фазу индуцируются неприводимым представлением τ_5 Г-точки зоны Бриллюэна со звездой волнового вектора $\vec{k}_{11} = 0$ без мультипликации элементарной ячейки. Пространственная группа симметрии тетрагональной фазы $I4_1/amd$. Фазовый переход в орторомбическую фазу с симметрией $Fddd$ индуцируется по тому же неприводимому представлению, которое является двумерным, и матрицы этого представления образуют группу симметрии параметра порядка (L -группу) C_{3v} .

Однако низкотемпературные фазовые переходы в интерметаллидах происходят с появлением спонтанной намагниченности и индуцируются по трехмерному неприводимому представлению τ_9 Г-точки зоны Бриллюэна исходной высокосимметричной фазы. Это означает, что термодинамический потенциал, описывающий структурные и магнитные фазовые переходы, зависит от двух взаимодействующих параметров порядка: двумерного с $L = C_{3v}$, описывающего структурные фазовые переходы, и трехмерного с $L = T_d$, ответственного за фазовые переходы в магнитоупорядоченное состояние, то есть L -группа должна

быть $L = T_d \oplus C_{3v}$ и составной параметр порядка пятикомпонентный. Построение и исследование потенциала с такой симметрией параметров порядка представляется чрезвычайно сложной технической задачей. Тем не менее, теоретико-групповой анализ с применением теории инвариантов и метода эффективного потенциала [2] позволяет существенно упростить процедуру построения адекватной феноменологической модели. В работах [3, 4] показано, что низкотемпературная орторомбическая фаза в соединении RCo_2 имеет пространственную группу симметрии $Imma$. Последовательность фазовых переходов следующая: $Fd\bar{3}m \rightarrow I4_1/amd \rightarrow Imma$. Структурный фазовый переход из кубической в тетрагональную фазу происходит по двумерному параметру порядка, причём в тетрагональной фазе отлична от нуля только одна компонента, то есть фазовый переход реализуется по схеме $(00) \rightarrow (\eta 0)$ или для полного параметра порядка $(00000) \rightarrow (\eta 0000)$. Переход в магнитоупорядоченное состояние также происходит с появлением одной компоненты параметра порядка. Тогда, применяя метод эффективного потенциала, можно рассмотреть модель с двумя однокомпонентными параметрами порядка, сохранив при этом все характерные особенности поведения интерметаллидов. Расчёт, проведенный с использованием программы ISOTROPY, показывает, что базисные инварианты в этом случае до третьей степени $J_1 = \eta$, $J_2 = M^2$, где η – эластический параметр порядка, M – спонтанная намагниченность. Формально математически можно считать, что параметр η полносимметричный с

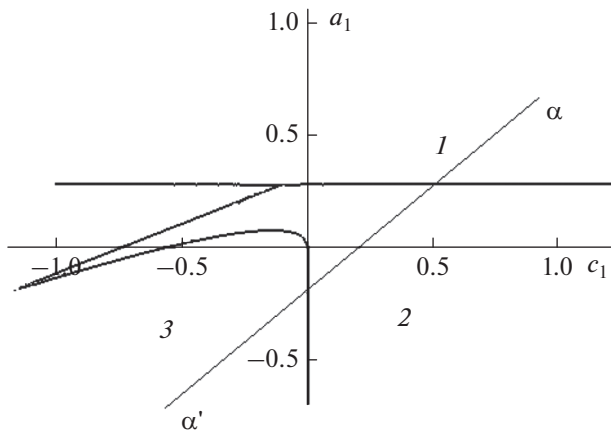


Рис. 1. Фазовая диаграмма модели (1).

группой $L = C_1$, и симметрия магнитного параметра порядка M определяется группой $L = C_s$. Феноменологическая модель с группой симметрии составного параметра порядка $L = C_1 \oplus C_s$, построенная методами теории катастроф с применением эквивариантных векторных полей [5], в математической безразмерной форме имеет вид:

$$F = \alpha_1 J_1^2 + \alpha_2 J_1^3 + \alpha_3 J_2 + \alpha_4 J_1 J_2 + J_1^4 + \mu J_1^2 J_2 + J_2^2.$$

После перенормировки и замены переменных феноменологическая физическая модель фазовых переходов принимает форму

$$\Phi = a_1 \eta^2 + b_1 \eta^3 + c_1 M^2 + c_2 M^4 + d_1 \eta M^2 + d_2 \eta^2 M^2 + a_2 \eta^4 - MH, \quad (1)$$

где η – структурный параметр порядка, M – спонтанная намагниченность, H – напряженность внешнего магнитного поля. Модель (1) описывает три различные по симметрии фазы: 1. $\eta = 0, M = 0$ – высокосимметричная фаза; 2. $\eta \neq 0, M = 0$ – эластическая (деформационная) фаза; 3. $\eta \neq 0, M \neq 0$ – эластическая и магнитная фаза. Для обеспечения глобальной минимальности потенциала (1) необходимо выполнение условий $a_2 > 0, c_2 > 0, a_2^2 c_2^2 - 2d_2 \neq 0$. Двумерное сечение фазовой диаграммы в координатах a_1 - c_1 модели приведено на рис. 1. Как видно из рисунка, в области фазы 3 находится конечная критическая точка типа жидкость–пар и линия изоморфных фазовых переходов. Полагая, что коэффициенты a_1 и c_1 линейно зависят от температуры: $a_1 = a_1'(T - T_1), c_1 = c_1'(T - T_2)$, причем $a_1' > 0, c_1' > 0$, можно изобразить термодинамический путь на фазовой диаграмме (рис. 1) прямой линией $\alpha\alpha'$.

Тогда на температурных зависимостях физических свойств в модели появляются две анома-

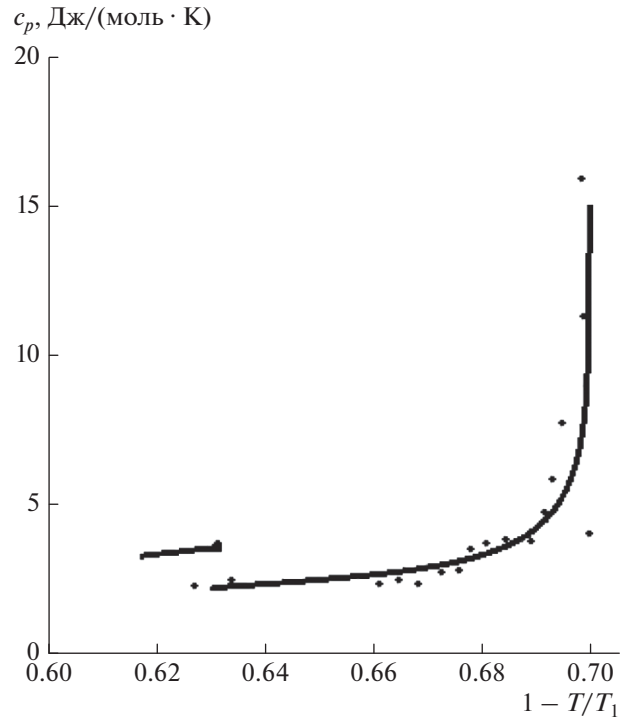


Рис. 2. Теоретическая температурная зависимость теплоемкости, рассчитанная по модели (1) для термодинамического пути $\alpha\alpha'$ (рис. 1). Точками показаны экспериментальные данные теплоемкости в соединении HoCo_2 из работы [6].

лии, обусловленные пересечением прямой $\alpha\alpha'$ линии фазовых переходов из фазы 1 в фазу 2, а затем линии фазового перехода второго рода из фазы 2 в фазу 3. Для данного термодинамического пути по модели (1) рассчитана теоретическая температурная зависимость аномальной части теплоемкости, представленная на рис. 2, и проведено сопоставление этой кривой с экспериментальными результатами аномальной части теплоемкости в соединении HoCo_2 [6], отмеченными на рис. 2 точками. Как видно, теоретическая зависимость удовлетворительно описывает экспериментальные данные.

Также по модели (1) построены теоретические зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля (рис. 3а). Расчеты проводились для температур, близких к точке фазового перехода в ферромагнитное состояние. Сопоставление теоретических зависимостей с экспериментальными данными работы [7] для интерметаллида ErCo_2 (рис. 3б) также показывает качественное удовлетворительное соответствие.

Следует отметить, что гистерезис, наблюдаемый на полевых зависимостях намагниченности в ErCo_2 , в рамках рассматриваемой модели может быть интерпретирован как изоструктурный переход, при котором изменение кристаллической

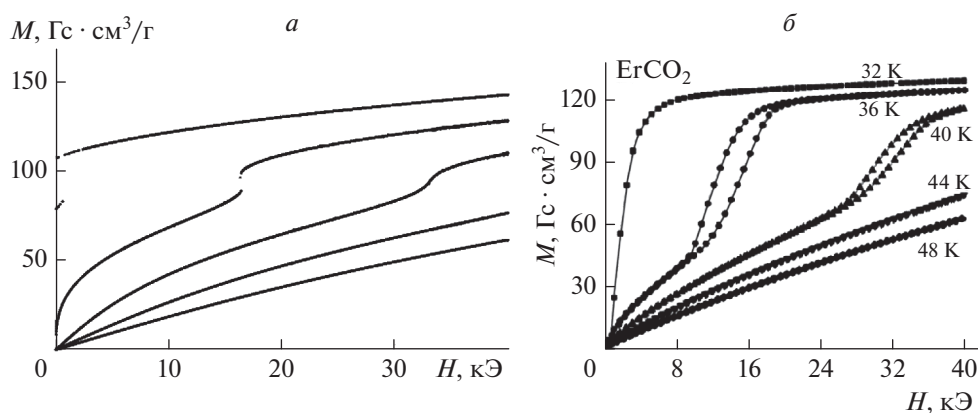


Рис. 3. Полевые изотермы намагниченности, рассчитанные по модели (1) (а) и экспериментальные данные для соединения ErCO_2 (б) [7].

структуры кристалла происходит без изменения его пространственной группы. Таким образом, низкотемпературный фазовый переход в интерметаллидах в значительной мере может быть обусловлен взаимодействием структурной и магнитной подрешеток (систем) кристалла.

Отметим, что “S”-образная форма изотерм, а также наличие полевого гистерезиса показывает наличие в данном соединении фазового перехода первого рода, который может быть обусловлен зонным метамагнетизмом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ouyang Z.W., Wang F.W., Huang Q. et al.* // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. № 6. Art. № 064405.
2. *Гуфан Ю.М.* Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. 302 с.
3. *Xiao Y.G., Huang Q., Ouyang Z.W. et al.* // *J. Alloys Compounds.* 2006. V. 420. № 1. P. 29.
4. *Mudryk Y., Paudyal D., Pathak A.K. et al.* // *J. Mater. Chem. C.* 2016. V. 4. № 20. P. 4521.
5. *Павлов С.В.* // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. астрон.* 2016. № 2. С. 62; *Pavlov S.V.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2016. 16. № 2. P. 202.
6. *Voiron J., Berton A., Chaussy J.* // *Phys. Lett.* 1974. V. 50A. № 1. P. 17.
7. *Singh N.K., Suresh K.G., Nigam A. K et al.* // *J. Magn. Mater.* 2007. V. 317. № 1. P. 68.