

## Возможность образования и обратимой перестройки равновесной доменной структуры в антиферромагнетиках

Е. В. Гомонай<sup>1</sup>, В. М. Локтев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»  
пр. Перемоги, 37, г. Киев, 03056, Украина  
E-mail: malyshen@ukrpack.net

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины  
ул. Метрологическая, 14, б, г. Киев, 03143, Украина  
E-mail: vloktov@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 8 января 2002 г.

Показано, что магнитоупругое взаимодействие может играть существенную роль в формировании равновесной доменной структуры в антиферромагнетиках, имеющих два и более эквивалентных легких направления оси магнитной анизотропии. В рамках феноменологической модели с использованием методов нелинейной теории упругости продемонстрировано, что поверхность кристалла может служить и служит источником фиктивных «упругих зарядов» несовместности, следствие которых аналогично следствию существования магнитостатических зарядов, возникающих на поверхности ферромагнитных кристаллов и приводящих к образованию доменов. При этом поверхность кристалла рассматривается как особая фаза со своими магнитными, упругими и магнитоупругими свойствами. Поле «упругих зарядов» является дальнодействующим и, соответственно, дает пропорциональный объему, а не площади поверхности образца вклад в энергию «раздвойникования», которая играет основную роль в формировании равновесной доменной структуры. Возникновение последней есть не что иное, как восстановление исходной глобальной симметрии кристалла в тех случаях, когда фазовое превращение, идущее с ее спонтанным нарушением, описывается параметром порядка, который сопряжен со сдвиговой деформацией. Условия отсутствия «упругих зарядов» внутри образца накладывают определенные ограничения на морфологию магнитоупругой доменной структуры в антиферромагнетиках. Обсуждается влияние дисклинаций, возникающих в месте стыка трех и более доменов, на характер равновесного состояния кристалла.

Показано, що магнітопружна взаємодія може відігравати суттєву роль у формуванні рівноважної доменної структури в антиферомагнетиках, що мають два і більше еквівалентних легких напрямків осі магнітної анізотропії. В межах феноменологічної моделі з використанням методів не лінійної теорії пружності продемонстровано, що поверхня кристала може бути і є джерелом фіктивних «пружних зарядів» несумісності, наслідків яких аналогічні наслідкам існування магнітостатичних зарядів, що виникають на поверхні феромагнітних кристалів і призводять до утворення доменів. При цьому поверхня кристала розглядається як особлива фаза із своїми магнітними, пружними і магнітопружними властивостями. Поле «пружних зарядів» є далекосяжним і, відповідно, робить пропорційний об'єму, а не площині поверхні зразка внесок в енергію «роздвійництва», яка грає основну роль в формуванні рівноважної доменної структури. Поява останньої є нічим іншим, як відновленням вихідної глобальної симетрії кристала в тих випадках, коли фазове перетворення, що йде з її спонтанним порушенням, описується параметром порядку, який спряжений з деформацією зсуву. Умови відсутності «пружних зарядів» вузької зразка накладають відповідні обмеження на морфологію магнітної доменної структури в антиферомагнетиках. Обговорюється вплив дисклінацій, які виникають у місці стику трьох та більше доменів, на характер рівноважного стану кристала.

PACS: 75.50.Ee, 75.60.Ch

## 1. Введение

Проблема происхождения и описания доменной структуры (ДС) в антиферромагнитных (АФМ) кристаллах имеет долгую (начиная с работ Нееля [1]) историю и неоднократно обсуждалась в литературе (см., например, [2–5]). Эта проблема тесно связана с вопросом о происхождении ДС в веществах, в которых фазовые переходы сопровождаются возникновением сдвиговых спонтанных деформаций, тензор которых имеет ту же симметрию, что и первичный параметр порядка (так называемые ферроэластические или термоупругие переходы). Обычно при переходах такого типа спонтанные деформации появляются одновременно с перестройкой электронной структуры вещества (как, например, при мартенситных фазовых переходах) или с возникновением векторного/тензорного параметра порядка магнитной, поляризационной и другой природы.

В случае, когда имеется несколько кристаллографически эквивалентных направлений для вектора, представляющего собой первичный параметр порядка, и, соответственно, тензор деформаций также вырожден, ДС является термодинамически равновесной и меняется обратимым образом под действием внешнего магнитного поля и/или механических напряжений. Внешние поля также могут привести к полной монодоменизации образца, и тем не менее после выведения поля доменная структура восстанавливается.

Природа равновесной ДС в ферро- и ферримагнетиках с противоположным направлением векторов намагниченности в соседних доменах изучена давно и подробно (см., например, [6]); ее возникновение связывают с конечным размером образца и эффектами размагничивания, обусловленными формированием на поверхности образца (поверхности раздела двух сред с различными магнитными свойствами) фиктивных магнитных зарядов. Однако для магнитных сред, не обладающих нескомпенсированным магнитным моментом (например, АФМ), или веществ с исчезающе малой спонтанной намагниченностью (слабые ферромагнетики) вопрос о происхождении экспериментально наблюдаемой [7–10] равновесной ДС остается, по сути, открытым.

В работах [11,12] нами предложен один из возможных механизмов образования равновесной ДС, основанный на поверхностных эффектах: было предположено, что изменение формы образца, обусловленное возникновением и перестройкой ДС, приводит к понижению поверхностной

энергии. Несмотря на весьма хорошее качественное и количественное согласие с результатами экспериментов по измерению магнитострикции легкоплоскостного АФМ  $\text{CoCl}_2$  во внешнем магнитном поле [7], область применения этой модели ограничена либо кристаллами достаточно малых размеров, либо образцами с хорошо развитой поверхностью (типа пленок), для которых поверхностные эффекты могут играть существенную роль.

В настоящей работе сделаем попытку обобщить ранее полученные результаты [11,12] и показать, что образование термодинамически равновесной ДС в ходе термоупругого (ферроэластического) фазового перехода может быть объяснено влиянием достаточно жесткой (слабо-деформируемой) поверхности кристалла, и, что особенно важно, соответствующий вклад в энергию образца зависит от его объема, а не от площади поверхности, и потому сам эффект доменообразования оказывается не зависящим от размеров кристалла.

Для нас большая часть посвятить эту статью крупному украинскому физику-экспериментатору проф. В. В. Еременко, чей вклад в физику низких температур, физику магнитных явлений, магнитооптику, и, в частности в развитие методов визуализации ДС в магнитных средах (см., например, [3,13,14]), является широко известным и общепризнанным.

## 2. Модель

Рассмотрим образец, имеющий объем  $V$  и ограниченный поверхностью с площадью  $S$ . Предположим, что при температуре выше температуры магнитного фазового перехода образец не напряжен и не деформирован. Ниже критической температуры решетка кристалла становится неустойчивой по отношению к возникновению спонтанных деформаций, индуцированных флуктуациями первичного параметра порядка (намагниченности, поляризации и т.п.). Спонтанные деформации, как и в случае мартенситных фазовых переходов и при переходе в АФМ состояние, также могут быть обусловлены нелинейными упругими эффектами. Подчеркнем, что в обоих случаях отсутствуют эффекты размагничивания.

В неограниченном образце пространственное распределение тензора спонтанных деформаций  $\hat{u}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор заданной точки, описывается уравнением, получающимся из условия минимума упругой (и магнитоупругой) энергии кристалла  $f_{\text{elas}}(\hat{u})$  по переменным  $\hat{u}$ :

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}(\hat{u})}{\partial \hat{u}(\mathbf{r})} = 0. \quad (1)$$

Уравнение (1) эквивалентно условию отсутствия внутренних сил:  $\operatorname{div} \hat{\sigma}(\mathbf{r}) = 0$ , где  $\hat{\sigma}$  — тензор напряжений. Кроме того, при анализе равновесного упругого состояния в терминах тензора деформаций необходимо рассматривать дополнительное условие — совместности деформаций при отсутствии внутренних дефектов\*. В приближении линейной теории упругости условие совместности формально можно записать как условие обращения в нуль некоторого тензора (см., например, [15]):

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{r}) &\equiv -\operatorname{rot} (\operatorname{rot} \hat{u}(\mathbf{r}))^T = 0, \\ \eta_{il} &= -e_{ijk} e_{lmp} \nabla_j \nabla_m u_{kp}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $e_{ijk}$  — символ Леви–Чевита, а операция  $T$  отвечает транспонированию. В однородном неограниченном кристалле плотность упругой энергии  $f_{\text{elas}}(\hat{u})$  не зависит от пространственных производных тензора деформаций, вследствие этого равновесные деформации также однородны и условия (2) удовлетворяются тривиально.

Ситуация меняется коренным образом, если учесть наличие поверхности, задаваемой в параметрическом виде уравнением  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_S$ . Поверхность кристалла обладает особыми, отличными от объемных, упругими, магнитными и магнитоупругими свойствами и может рассматриваться как отдельная фаза\*\*. В силу возникшей таким образом неоднородности однородные деформации, определяемые уравнением (1), неизбежно приведут к дополнительным напряжениям в кристалле. Вклад соответствующей, чисто поверхностной, энергии в полную энергию кристалла описывается слагаемыми типа [16]:

$$F_{\text{surf}} = \int dS [\alpha_S + \hat{\beta}_S \hat{u}_S(\mathbf{r}_S) + \frac{1}{2} \hat{u}_S(\mathbf{r}_S) \hat{c}_S \hat{u}_S(\mathbf{r}_S)], \quad (3)$$

где  $\alpha_S, \hat{\beta}_S$  — коэффициенты поверхностного напряжения,  $\hat{c}_S$  — тензор поверхностных модулей

упругости, а  $\hat{u}(\mathbf{r}_S)$  — тензор поверхностных деформаций. Заметим, что первые два слагаемые в выражении (3) отвечают за установление равновесной формы образца (соответствующей минимуму поверхностной энергии при заданном объеме), а последнее слагаемое может оказаться существенным при анализе фазовых переходов, сопровождающихся возникновением спонтанных деформаций.

В последующем изложении будем считать, что свойства поверхности образца задаются процессом его изготовления, а сама поверхность является достаточно инертной, в том смысле, что не релаксирует при наложении и изменении внешних полей. В такой модели можно отвлечься от влияния поверхностного натяжения (3), поскольку мы фактически полагаем энергетический барьер, определяющий изменение равновесной формы кристалла при наличии спонтанных деформаций, достаточно высоким по сравнению с изменением термодинамического потенциала при фазовом переходе, а соответствующее время релаксации достаточно большим по сравнению с характерным временем перестройки структуры кристалла. Такое приближение оправдано для переходов в АФМ состояние в силу малости величины магнитной энергии и производимых спонтанных деформаций (максимальная величина спонтанной деформации при магнитном фазовом переходе не превышает величину  $\approx 10^{-3}$ ), а также для ряда термоупругих мартенситных переходов, протекающих со скоростями, близкими к скорости звука.

Близи поверхности спонтанные деформации, возникающие в ходе термоупругого фазового перехода, можно представить в виде суммы трех слагаемых:

$$\begin{aligned} \hat{u}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{3} \hat{\mathbf{1}} \operatorname{Tr} \hat{u} + \hat{u}_{\text{shear}} + \\ &+ [(\mathbf{n}_S \hat{u}) \otimes \mathbf{n}_S + \mathbf{n}_S \otimes (\hat{u} \mathbf{n}_S) - \mathbf{n}_S \otimes \mathbf{n}_S (\mathbf{n}_S \hat{u} \mathbf{n}_S)], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\hat{\mathbf{1}}$  — единичная матрица;  $\mathbf{n}_S$  — нормаль к поверхности кристалла в заданной точке, а символ

\* По сути это условие сводится к следующему. Изменение упругого состояния кристалла описывается вектором смещений, который имеет три независимых компоненты. В экспериментах же измеряется не непосредственное смещение точек кристалла, а относительное, т.е. тензор деформаций. Симметричный тензор деформаций имеет шесть компонент, но, очевидно, только три из них являются независимыми. Условия совместности служат дополнительными связями, уменьшающими количество независимых компонент до трех и отражающими отсутствие внутри образца разрывов и «складок».

\*\* Различие таких характеристик, как температура упорядочения в объеме кристалла и на поверхности, следует из очевидного отличия координационного числа атомов либо размерных эффектов. Различия могут быть вызваны также и тем, что, как правило, дефекты и примеси сегрегируют из объема кристалла на его поверхность, существенно изменения химические и физические свойства последней.

⊗ определяет прямое тензорное произведение векторов. Первое слагаемое в (4) описывает относительное изменение объема, сохраняющее форму образца (изоморфная стрикция). Три слагаемые в скобках образуют компоненты тензора деформации, соответствующие смещениям вдоль вектора нормали  $\mathbf{n}_S$  к поверхности, а второе слагаемое, составленное таким образом, чтобы след его равнялся нулю, соответствует сдвиговым (по отношению к  $S$ ) деформациям. Первое слагаемое существенно при описании магнитных фазовых переходов (оно может влиять на положение точки перехода), однако при рассмотрении термоупругих фазовых переходов может быть опущено, поскольку не связано с изменением симметрии кристалла и, следовательно, не может влиять на процессы установления и перестройки ДС магнитоупругого и/или чисто упругого происхождения. По той же причине можно пренебречь и последним слагаемым в (4). Таким образом, ниже будем рассматривать только сдвиговую часть тензора деформации<sup>\*</sup>  $\hat{u}_{\text{shear}}$  и определять деформированное состояние по отношению к состоянию с изоморфной стрикцией, учет которой достаточно тривиален.

В простейшем предположении абсолютно жесткой поверхности, не деформируемой при фазовом переходе, т.е. при  $\hat{c}_S = \infty$ , граничные условия на поверхности образца сводятся к условию отсутствия напряжений

$$\left\{ \frac{\partial f_{\text{elas}}(\hat{u})}{\partial \hat{u}} \right\}_{\mathbf{r} \in S} \mathbf{n}_S(\mathbf{r}_S) = 0 \quad (5)$$

и условию отсутствия деформаций

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_S(\mathbf{r}_S) \times \hat{u}(\mathbf{r}_S) \times \mathbf{n}_S(\mathbf{r}_S) &= 0, \\ e_{ijk}e_{lmp}u_{jm}(\mathbf{r}_S)n_S^k(\mathbf{r}_S)n_S^p(\mathbf{r}_S) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

которые легко получаются из определения тангенциальных компонент тензора деформации. Введенный в выражениях (5), (6) вектор  $\mathbf{n}_S(\mathbf{r}_S)$

определяет нормаль к поверхности образца в заданной точке.

Следовательно, задача об установлении пространственного распределения деформаций в образце заданной формы при переходе через критическую точку может быть сформулирована таким образом: поле равновесных деформаций  $\hat{u}(\mathbf{r})$  должно удовлетворять уравнениям (1) и (2) в объеме образца ( $\mathbf{r} \in V \setminus S$ ) и уравнениям (5) и (6) на его поверхности ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_S \in S$ ).

При термоупругом фазовом переходе или переходе в АФМ состояние в кристалле неизбежно возникают спонтанные деформации, нарушающие его локальную симметрию. При этом появление однородных деформаций в образце произвольной формы приводит к нарушению условия (6) хотя бы в части точек поверхности. Исключение составляет только случай особой формы образца — очень тонкого диска или пластины, вырезанной таким образом, чтобы поверхность пластины совпадала с плоскостью однородного сдвига<sup>\*\*</sup>.

### 3. Энергия «раздвойникования»

Для выяснения характера распределения неоднородных деформаций (например, магнитоупругих доменов в АФМ) воспользуемся аналогией с хорошо известной задачей о формировании доменов в ферромагнетике. Предположим, что равновесная (и вообще говоря, неоднородная) сдвиговая деформация кристалла, удовлетворяющая условию (6), состоит из двух частей:

$$\hat{u}_{\text{shear}}(\mathbf{r}) = \hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}) + \hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Слагаемое  $\hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r})$  соответствует собственной спонтанной деформации, обусловленной переходом в магнитоупорядоченное состояние, и определяется из условий минимума свободной энергии (1). Слагаемое  $\hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r})$  определяет дополнительные деформации, которые создаются «упругими

\* Заметим, что изоморфная стрикция и сдвиговая деформация образуют базис различных неприводимых представлений группы симметрии кристалла в параметрической фазе (изоморфная стрикция всегда преобразуется по тождественному представлению, а сдвиговая деформация связана с понижением симметрии параметрической фазы и по тождественному представлению преобразовываться не может). Раздельное рассмотрение вклада изоморфной и сдвиговой деформаций по сути означает, что в свободной энергии кристалла мы пренебрегаем малыми слагаемыми, связанными с ангармонизмом.

\*\* Такая ситуация возникает, например, в чистом кобальте при структурном фазовом переходе ГЦК–ГПУ. Фазы переходят друг в друга путем сдвига плотноупакованных плоскостей, и, таким образом, межфазная граница является когерентной (т.е. совместность деформаций ГЦК и ГПУ фаз не нарушается) даже на микроскопическом уровне. Условия совместности между деформированным объемом и поверхностью тривиальным образом выполняются также в случае, когда нормаль к поверхности образца ориентирована вдоль направления сжатия (растяжения), спонтанно возникающего при фазовом переходе. Для образца конечных размеров несовместность, однако, возникает на боковой поверхности кристалла.

зарядами», порожденные несовместностью на поверхности кристалла:

$$\hat{e}_{\text{elas}}(\mathbf{r}) = -\mathbf{n}_S \times \hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}_S) \times \mathbf{n}_S \delta'[\mathbf{n}_S(\mathbf{r} - \mathbf{r}_S)], \quad (8)$$

где  $\delta'$  — производная дельта-функции Дирака по аргументу. Функция  $\hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r})$  является решением уравнения (подробности можно найти в книге [15])

$$\text{rot}(\text{rot} \hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r}))^T = \hat{e}_{\text{elas}}(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Частное решение уравнения (9) имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4\pi} \int_V d\mathbf{r}_1 \frac{\hat{e}_{\text{elas}}(\mathbf{r}_1) - \hat{\mathbf{1}} \text{Tr} \hat{e}_{\text{elas}}(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_S dS \frac{(\mathbf{n}, \mathbf{r} - \mathbf{r}_S)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_S|^3} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}_S) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}_S), \end{aligned} \quad (10)$$

где  $d\Omega_{\mathbf{r}}$  — элемент телесного угла, под которым точка поверхности  $\mathbf{r}_S$  видна из заданной точки  $\mathbf{r}$  внутри кристалла. Введенную в (10) величину

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}_S) \equiv \hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}) + \mathbf{n}_S \otimes \mathbf{n}_S \text{Tr} \hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}) -$$

$$- \mathbf{n}_S \otimes (u'_{\text{ms}}(\mathbf{r}) \mathbf{n}_S) - (\hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}) \mathbf{n}_S) \otimes \mathbf{n}_S$$

можно интерпретировать как плотность «зарядов» на поверхности кристалла, создающую дополнительное поле напряжений, приводящих к двойникованию (по аналогии с ферромагнетиками, в которых магнитные заряды создают поля размагничивания, эти напряжения можно назвать напряжениями «раздвойникования»):

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \hat{c} \hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r}), \quad (11)$$

где  $\hat{c}$  — тензор модулей упругости. Распределение равновесных деформаций при наличии недеформируемой поверхности может быть найдено из уравнения

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}(\mathbf{r})}{\partial \hat{u}(\mathbf{r})} = \hat{c} \hat{u}_{\text{ch}}(\mathbf{r}), \quad (12)$$

которое получено комбинацией уравнений (1) и (11). Легко видеть, что уравнение (12) можно также получить вариацией функционала свободной энергии по компонентам тензора деформаций, удовлетворяющих условию совместности деформаций (2) в объеме образца<sup>\*</sup>:

$$\Phi = \int_V d\mathbf{r} f_{\text{elas}}(\mathbf{r}) - F_{\text{stray}}, \quad (13)$$

где введена энергия «раздвойникования»

$$F_{\text{stray}} = \frac{1}{4\pi} \int_V d\mathbf{r} \int_S dS \frac{(\mathbf{n}, \mathbf{r} - \mathbf{r}_S)}{|(\mathbf{r} - \mathbf{r}_S)|^3} \hat{u}(\mathbf{r}) \hat{c} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}_S), \quad (14)$$

не рассматривавшаяся нами в [11, 12].

Развитый выше подход позволяет решать сложную задачу о равновесной ДС в нелинейной среде при наличии внешнего магнитного поля в терминах тензора деформаций, который в отличие от вектора смещений является наблюдаемой величиной, и симметрия которого связана с симметрией первичного параметра порядка фазового перехода.

Продолжая аналогию с задачей о ДС ферромагнетика, следует обратить внимание на некоторые особенности внутренних двойникоющихся полей в термоупругих кристаллах. Прежде всего, из формул (10), (11) следует, что «упругие заряды», обусловленные несовместностью деформаций на поверхности, создают дополнительные деформации  $\hat{u}_{\text{ch}}$  и соответствующие им макронапряжения, величина которых существенно зависит от формы образца. Поля напряжений, создаваемые этими зарядами, подобно кулоновскому полю являются дальнодействующими, и поэтому их вклад в энергию пропорционален объему кристалла  $V$ . Таким образом, рассматриваемый эффект доменообразования не является поверхностным и не зависит от размеров образца.

В противоположность ферромагнетикам, для которых фиктивные магнитные заряды на поверхности — скалярные величины, «упругие заряды» (в том числе, в АФМ) имеют тензорный характер (см., например, (8)), что существенно усложняет задачу. Однако, когда образец имеет форму тонкой пластины, двойникоющие напряжения внутри кристалла однородны, и задача может быть решена до конца. Именно этот случай и будет рассмотрен ниже. Еще одной замечательной характеристикой поля дополнительных (магнито)упругих деформаций (10) является то, что оно масштабно инвариантно. Другими словами, распределение деформаций внутри образца зависит только от угла, под которым участок поверхности, содержащей «упругие заряды», виден из данной точки кристалла. Следовательно, любое преобразование, сохраняющее форму образца не-

\* Уравнение (12) в дивергентной форме можно получить и путем вариации функционала (13), (14) по трем компонентам вектора смещения. Очевидно, что в этом случае условия совместности выполняются автоматически.

изменной, не отражается на распределении дополнительных деформаций.

Из сказанного выше можно сделать достаточно общий вывод. В случае фазовых переходов, вызванных изменением температуры, макроскопическая симметрия кристалла в целом не изменяется. Если на микроскопическом уровне переход идет со спонтанным нарушением симметрии и микроскопический параметр порядка (например, вектор антиферромагнетизма в АФМ) симметрийно сопряжен со сдвиговыми компонентами тензора деформаций, то локально нарушенная симметрия восстанавливается в среднем за счет образования ДС упругого происхождения.

#### 4. Равновесная доменная структура

Как видно из выражений (13) и (14), ниже температуры магнитного фазового перехода форма образца существенно влияет на распределение равновесных деформаций. Рассмотрим этот эффект подробнее на простом примере, когда образец имеет форму тонкой пластины и соответствующие двойникующие напряжения однородны.

Пусть ориентация поверхности пластины задается вектором нормали  $\mathbf{n}_S$ , координаты которого определяются по отношению к кристаллическим осям в высокосимметричной (парамагнитной) фазе. Поперечные размеры  $L$  в плоскости пластины будем считать существенно большими, чем ее толщина  $d$ . Тогда основной вклад в энергию «раздвойникования» (14) вносит магнитострикция, усредненная по объему кристалла:

$$\langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle = \frac{1}{V} \int_V dV \hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Подставляя (15) в (10) и (11), получаем простое выражение для напряжений, создаваемых «зарядами»:

$$\hat{\sigma}_{\text{macro}} = \hat{c} \langle \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{r}_S) \rangle. \quad (16)$$

В окончательном виде энергия «раздвойникования» получается из уравнений (14) и (16):

$$F_{\text{stray}} = L^2 d \left\{ \langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle \hat{c} \langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle + \mathbf{n}_S \otimes \mathbf{n}_S \text{Tr} \langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle - \mathbf{n}_S \otimes (\langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle \mathbf{n}_S) - (\langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle \mathbf{n}_S) \otimes \mathbf{n}_S \right\}. \quad (17)$$

Если ограничиться рассмотрением только сдвиговых деформаций, т.е.  $\hat{u}_{\text{ms}} = \hat{u}_{\text{shear}}$ , как это было сделано выше (см. (4) и (7)), то энергия «раздвойникования» приобретает вид

$$F_{\text{stray}} = L^2 d \langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle \hat{c} \langle \hat{u}_{\text{ms}} \rangle \geq 0, \quad (18)$$

откуда явно следует ее положительная определенность для сдвиговых деформаций любого типа. Как и для ферромагнетиков, в отсутствие внешнего поля (для образца, форма которого в парамагнитной фазе не понижает кристаллической симметрии) энергия «раздвойникования»  $F_{\text{stray}}$  может быть минимизирована только за счет обращения в нуль средних сдвиговых деформаций. Заметим, что выражение (18) совпадает с формулой (2) нашей работы [11], написанной исходя исключительно из феноменологических соображений.

Величина  $F_{\text{stray}}$  (18) очевидным образом зависит от формы образца, в данном случае от ориентации поверхности пластинки по отношению к кристаллографическим осям. Если, в частности, нормаль  $\mathbf{n}_S$  к поверхности образца направлена вдоль главной оси кристалла  $C_n$  ( $n = 3, 4$  или  $6$ ), то макроскопическая симметрия образца совпадает с точечной группой симметрии кристалла и не должна изменяться при фазовом переходе. Это означает, что при такой геометрии все типы доменов должны быть представлены в одинаковой мере.

Проведенные выше вычисления убедительно показывают, что возникновение однородных спонтанных сдвиговых деформаций в образце конечных размеров должно привести к существенному увеличению энергии всего кристалла, а потому является энергетически невыгодным. Существует тесная аналогия между возникновением дальнодействующих упругих полей в веществах, испытывающих фазовый переход со спонтанными деформациями, и дипольными полями в ферромагнетиках (аналогия между уравнениями для электромагнитных полей в веществе и уравнениями теории упругости была отмечена де Витом более 40 лет назад [17]). Случай слабого ферромагнетика требует особого рассмотрения, так как в нем ДС может образовываться за счет как слабых (в меру малости намагниченности) дипольных, так и магнитоупругих дальнодействующих взаимодействий. Изучение соответствующих конкурирующих вкладов выходит за рамки настоящей работы.

Еще один важный вопрос, возникающий при анализе выражения (17), сводится к тому, является ли в действительности энергетически выгодным установление доменной (двойниковой) структуры при магнито-либо термоупругом фазовом переходе. Дело в том, что неоднородное распределение деформаций неизбежно связано с повышением энергии кристалла за счет энергии доменных границ (даже, если эти границы когерентны). Для сопоставления выигрыша в энергии

«раздвойникования» (18) и проигрыша, обусловленного вкладом доменных стенок, будем следовать процедуре, применяемой в случае ферромагнетиков (см., например, [18]). Рассмотрим регулярную ДС, состоящую из чередующихся доменов двух типов, которые характеризуются тензорами деформации  $\hat{u}_1$  и  $\hat{u}_2$ . Предположим, что период ДС  $d_{DS}$  много меньше толщины пластины  $d_{DS} \ll d$ , домены сопрягаются когерентным образом и «замыкающие» домены отсутствуют, (т.е. вблизи поверхности деформация внутри домена такая же, как и в объеме).

Стандартные вычисления, основанные на выражениях (13) и (14), показывают, что вклад в свободную энергию, обусловленный «упругими зарядами», равен\*

$$F_{ch} = L^2 d_{DS} \xi_1 \xi_2 (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \hat{c} (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \cos \vartheta, \quad (19)$$

где  $\vartheta$  — угол между плоскостью поверхности пластины и границей раздела между доменами;  $\xi_1 = (1 - \xi_2)$  — объемная доля доменов первого типа.

Вклад доменных границ в полную энергию определяется выражением

$$F_{DW} = L^2 \sigma_{DW} \frac{d}{d_{DS}}, \quad (20)$$

где  $\sigma_{DW}$  — поверхностная энергия одной доменной границы на единицу площади.

Суммарная энергия  $F = F_{ch} + F_{DW}$  минимальна относительно периода ДС при

$$d_{DS}^{\text{opt}} = \frac{\sqrt{\sigma_{DW} d}}{\sqrt{\xi_1 \xi_2 (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \hat{c} (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \cos \vartheta}} \propto \sqrt{\frac{\sigma_{DW} d}{f_{\text{elas}}}}. \quad (21)$$

Величина, стоящая в выражении (21) в знаменателе первой дроби, по сути является плотностью энергии «упругих зарядов» (ср. с формулой (19)), которая, в свою очередь, пропорциональна плотности упругой энергии  $f_{\text{elas}} = \hat{u} \hat{c} \hat{u} / 2$ .

Энергия, связанная с появлением ДС с оптимальным периодом (21), будет равна

$$\begin{aligned} F &= 2L^2 \sqrt{\xi_1 \xi_2 (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \hat{c} (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \cos \vartheta \sigma_{DW} d} \propto \\ &\propto L^2 d f_{\text{elas}} \sqrt{\frac{a}{d}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь мы приняли следующую оценку для поверхностной энергии доменной границы:  $\sigma_{DW} \propto f_{\text{elas}} a$ , где  $a$  — толщина переходного слоя.

Таким образом, вклад, связанный с неоднородными деформациями и коротковолновым распределением «зарядов», пропорционален отношению  $d_{DS}/d \propto \sqrt{a/d} \ll 1$  и потому много меньше энергии «раздвойникования» (17), которая для однородной деформации, как уже отмечалось, пропорциональна объему кристалла и упругой энергии спонтанных деформаций. Это означает, что для достаточно больших образцов образование ДС в магнито- и термоупругих кристаллах весьма значительно уменьшает энергию кристалла.\*\*

## 5. Доменная структура в антиферромагнетике с анизотропией типа «легкая» плоскость

Проиллюстрируем теперь роль энергии «раздвойникования» на простом примере двухподрешеточного АФМ, имеющего форму тонкой пластины, поверхность которой перпендикулярна главной оси кристалла и совпадает с «легкой» плоскостью для магнитных векторов (спинов). Хорошими примерами такой системы служат монокристаллы  $\text{CoCl}_2$  (группа симметрии  $D_{3d}$ ) либо слабодопированного соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  при  $x \leq 0,3$  (группа симметрии  $D_{4h}$ ). Для этих кристаллов энергия «раздвойникования» (17) принимает вид

$$\begin{aligned} F_{\text{stray}} &= L^2 d [\frac{1}{2} c_{11} (\langle u_{xx} \rangle^2 + \langle u_{yy} \rangle^2) + \\ &+ c_{12} \langle u_{xx} \rangle \langle u_{yy} \rangle + 2c_{66} \langle u_{xy} \rangle^2], \end{aligned} \quad (23)$$

ось  $Z$  выбрана вдоль главной оси симметрии  $C_n$  (и перпендикулярна плоскости пластины). Свободная энергия кристалла во внешнем магнитном поле  $\mathbf{H}$  (в пренебрежение слабым размагничивающим эффектом, возникающим за счет наведенного полем малого магнитного момента) в общем виде может быть записана как

$$\begin{aligned} F &= L^2 d \sum_k \xi_k [E_{\text{an}} + \frac{M_0}{2H_E} (\mathbf{H} \mathbf{l}_k)^2 + \\ &+ M_0^2 \hat{u}_k \hat{\lambda}_{me} \mathbf{l}_k \otimes \mathbf{l}_k + \frac{1}{2} \hat{u}_k \hat{c} \hat{u}_k] + F_{\text{stray}}. \end{aligned} \quad (24)$$

\* Аналогичное выражение получено в работе [19] исходя из эмпирического принципа Сен-Венана.

\*\* Если толщина образца порядка или меньше оптимального периода ДС (21), то с энергетической точки зрения более предпочтительно состояние с однородной деформацией.

В выражение (24) входит плотность энергии магнитной анизотропии  $E_{an}$ , магнитоупругая энергия, определяемая тензором коэффициентов четвертого ранга  $\hat{\lambda}_{me}$ , и введены такие обозначения:  $M_0$  — намагниченность насыщения;  $2H_E$  — поле спин-флипа обменной природы;  $\mathbf{l}_k$  и  $\hat{u}_k$  — АФМ вектор и тензор спонтанной магнитострикции в  $k$ -м домене ( $k = 1, 2, 3$  для  $\text{CoCl}_2$  и  $k = 1, 2$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ );  $\xi_k$  — объемная доля  $k$ -го домена; угловые скобки означают усреднение по объему кристалла:  $\langle \hat{u}' \rangle = \sum_k \xi_k \hat{u}_k$  (напомним, что  $\sum_k \xi_k = 1$ ).

Минимизируя выражение (24) по отношению к компонентам АФМ вектора, тензора деформаций и доле доменов  $\xi_k$ , получаем, что вследствие перераспределения доменов эффективное магнитное поле внутри образца равно нулю до тех пор, пока внешнее поле не достигнет критического значения, равного

$$|\mathbf{H}| = H_{MD} \equiv \lambda_{\text{eff}} M_0 \sqrt{\frac{H_E M_0}{C_{\text{eff}}}}, \quad (25)$$

где  $\lambda_{\text{eff}}$  и  $C_{\text{eff}}$  — некоторые комбинации магнитоупругих и упругих констант, зависящие от конкретной симметрии кристалла. Величину  $H_{MD}$  можно интерпретировать как поле монодоменизации [11,12,20], которое хорошо измеряется в эксперименте (см., например, [9,10,21]).

В полях, меньших поля монодоменизации, сдвиговая деформация

$$\langle u_{\text{shear}} \rangle = \frac{\lambda_{\text{eff}} M_0^2}{C_{\text{eff}}} \left\{ \frac{H}{H_{MD}} \right\}^2 = u_0 \left\{ \frac{H}{H_{MD}} \right\}^2 \quad (26)$$

квадратичным образом зависит от величины внешнего магнитного поля, выраженного в единицах  $H_{MD}$ . (В выражении (26)  $u_0$  — величина спонтанной сдвиговой деформации.)

Таким образом, в рамках принятой модели низкополевая зависимость любой макроскопической характеристики, определяемой относительной долей упругих доменов, должна удовлетворять закону соответственных состояний, т.е. при  $H < H_{MD}$  иметь универсальный характер в зависимости от приведенной координаты  $H/H_{MD}$ . Универсальность\* такого типа была изучена нами на примере полевой зависимости магнито-сопротивления в слабодопированном соединении  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,3}$  [20].

Заметим, что в нашем описании неявно предполагается, что магнитные характеристики по-

верхности (например, ориентация и величина намагниченности подрешеток) не изменяются при наложении внешнего магнитного поля. Изменение свойств поверхности в ходе перестройки ДС под действием поля, равно как и наличие дефектов, закрепляющих доменные стенки, может привести к частичной необратимости и гистерезису в зависимости макроскопических характеристик кристалла от внешнего магнитного поля. Детальное рассмотрение этого вопроса выходит за рамки настоящей работы.

## 6. Морфология доменной структуры

Обсудим, наконец, вопрос о том, какова микроструктура АФМ при наличии доменов упругой природы и чем она обусловлена. Как показывают прямые наблюдения [21–23], морфология и взаимное расположение доменов во многих АФМ очень похожи на морфологию двойников и вариантов в мартенситах. Как правило, домены представляют собой плоскопараллельные пластинки приблизительно одинаковой (или соизмеримой) толщины, сопрягающиеся вдоль границ раздела, параллельных кристаллографическим плоскостям симметрии. При наложении внешнего магнитного поля границы доменов смещаются параллельно исходной плоскости, сохраняя плоскопараллельную структуру всех доменов. В кристаллах, имеющих более двух легких АФМ направлений [22], иногда наблюдается «елочная», или «паркетная» структура, в которой существует несколько систем «двойников», соответствующих различным парам магнитоупругих доменов. Эти системы, в свою очередь, также находятся в двойниковом соответствии, а границы раздела между ними в достаточной степени плоские, однако их толщина порядка толщины отдельных доменов. (Подчеркнем, что в отличие от мартенситов, в которых домены могут иметь форму клиньев («игл»), а мартенситная фаза может представлять собой включение в аустенитную матрицу, имеющее форму чечевицы, в АФМ наблюдались только плоскопараллельные системы доменов.)

Для интерпретации наблюдаемой морфологии ДС обратимся к модели «упругих зарядов», возникающих на внутренних границах раздела. Вообще говоря, задача о распределении намагниченности (АФМ вектора) внутри доменной границы с учетом магнитоупругих деформаций

\* Наблюдаемая в работе [9] универсальная зависимость магнитострикции от поля, нормированного на поле спин-флипа ( $H/2H_E$ ), относится к высокополевому участку и однодоменному состоянию.

достаточно сложна, поскольку требует, в частности, решения системы дифференциальных уравнений в частных производных для трех компонент вектора смещения, которые не могут быть сведены к одному уравнению в силу изотропности и дальнодействия упругих сил. Однако, следуя методике, предложенной в работе [24], будем предполагать, что границы раздела между доменами достаточно узкие, так что при анализе ДС образца можно детально не интересоваться распределением АФМ вектора внутри доменной стенки. В этом случае для анализа оптимальной ориентации доменной границы (в предположении о том, что она является плоской или, по крайней мере, относительно гладкой поверхностью с большим радиусом кривизны) достаточно воспользоваться уравнениями (7)–(10), в которых под нормалью  $\mathbf{n}_S$  следует понимать нормаль  $\mathbf{n}_{12}$  к границе раздела между доменами 1 и 2, а вместо  $\hat{u}_{\text{ms}}$  в формуле (9) следует взять разность спонтанных деформаций в соседних доменах:

$$\hat{e}_{\text{elas}} = -\mathbf{n}_{12} \times (\hat{u}_1 - \hat{u}_2) \times \mathbf{n}_{12} \delta'[\mathbf{n}_{12}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{12})]. \quad (27)$$

Как видно из уравнения (27), в случае, если тангенциальные (по отношению к границе раздела) компоненты тензора деформаций в соседних доменах одинаковы, то «упругие заряды» не возникают ( $\hat{e}_{\text{elas}}(\mathbf{r}) = 0$ ), деформации в соседних доменах совместны и не создают дополнительных дальнодействующих напряжений\*. В теории упругости стенки такого типа называют *наевскими* (Nye, см. [25]). Они аналогичны блоховским стенкам, наблюдаемым в ФМ, в том смысле, что последние также не содержат магнитных зарядов, создающих дальнодействующие поля. В противном случае несовместные деформации на стенке создают нескомпенсированные «упругие заряды», которые, согласно формуле (10), порождают дальнодействующее поле деформаций, дающее неотрицательный вклад (10) в энергию кристалла, и, таким образом, повышают поверхностную энергию  $\sigma_{DW}$  доменной стенки. Продолжая аналогию с магнетизмом, такие границы можно назвать неелевскими. Очевидно, что с энергетической точки зрения возникновение границ наивского типа более предпочтительно, причем поскольку условия совместности выполняются только для некоторых симметричных направлений  $\mathbf{n}_{12}$ , эти границы должны быть плоскими, что и наблюдалось экспериментально [21–23].

В качестве еще одного примера рассмотрим доменную границу в кристалле  $\text{CoCl}_2$ . Как уже отмечалось выше, в парамагнитной фазе группа симметрии кристалла  $D_{3d}$ , магнитная структура в однородном состоянии в полях, много меньших обменных, однозначно описывается углом  $\phi$  между АФМ вектором и осью 2-го порядка (ось  $X$ ), лежащей в базисной плоскости (предполагается, что магнитное поле  $\mathbf{H}$  перпендикулярно главной оси кристалла  $C_3$ ) [11]. Собственные спонтанные деформации  $\hat{u}_{\text{ms}}(\mathbf{r})$ , определяемые из условия минимума свободной энергии (1), имеют следующий вид:

$$u_{xx}^{\text{ms}} - u_{yy}^{\text{ms}} = -\Lambda_1 \cos 2\phi, \quad 2u_{xy}^{\text{ms}} = -\Lambda_1 \sin 2\phi,$$

$$u_{xz}^{\text{ms}} = \Lambda_2 \sin 2\phi, \quad u_{yz}^{\text{ms}} = \Lambda_2 \cos 2\phi,$$

$$u_{xx}^{\text{ms}} + u_{yy}^{\text{ms}} = 2M_0^2 \frac{2c_{13}\lambda_{31} - c_{33}(\lambda_{11} + \lambda_{12})}{(c_{11} + c_{12})c_{33} - c_{13}^2},$$

$$u_{zz}^{\text{ms}} = 2M_0^2 \frac{c_{13}(\lambda_{11} + \lambda_{12}) - (c_{11} + c_{12})\lambda_{31}}{(c_{11} + c_{12})c_{33} - c_{13}^2},$$

$$\Lambda_1 = 4M_0^2 \frac{c_{44}\lambda_{66} + 2c_{14}\lambda_{41}}{c_{66}c_{44} - c_{14}^2},$$

$$\Lambda_2 = 2M_0^2 \frac{c_{14}\lambda_{66} + 2c_{66}\lambda_{41}}{c_{66}c_{44} - c_{14}^2}, \quad (28)$$

где компоненты введенного в (24) тензора четвертого ранга  $\hat{\lambda}_{me}$  записаны в индексах Фойхта, причем первый индекс связан с упругими переменными, а второй – с магнитными. Как видно из выражений (28), в соответствии со сказанным выше, только сдвиговые компоненты тензора деформаций зависят от ориентации АФМ вектора.

В отсутствие магнитного поля (внешнего или эффективного внутреннего) равновесной магнитной конфигурации отвечают три различных эквивалентных значения  $\phi$ : 0 (домен типа 1) и  $\pm 2\pi/3$  (домены типа 2 и 3), соответствующие ориентации АФМ вектора вдоль одной из трех осей 2-го порядка. На границе, разделяющей домены 2 и 3, компоненты  $u_{xy}^{\text{ms}}$  и  $u_{xz}^{\text{ms}}$  испытывают скачок:

$$\Delta u_{xy}^{\text{ms}} \equiv u_{xy}^{(2)} - u_{xy}^{(3)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \Lambda_1, \quad (29)$$

$$\Delta u_{xz}^{\text{ms}} \equiv u_{xz}^{(2)} - u_{xz}^{(3)} = -\sqrt{3} \Lambda_2.$$

\* Заметим, что учет структуры доменной границы в АФМ показывает, что внутри стенки, на расстояниях порядка характерного размера магнитной неоднородности, локализуются «упругие заряды» противоположных знаков, однако на больших расстояниях от границы поле таких зарядов взаимно компенсируется.

Подстановка (29) в (27) показывает, что в случае, если плоскость доменной границы перпендикулярна оси симметрии 2-го порядка (ось  $\mathbf{n}_{23} \parallel X$ ), то плотность упругих зарядов на границе  $\hat{e}_{\text{elas}} = 0$ , т.е. доменная стенка является наевской. При любой другой ориентации плоскости доменной границы тензор  $\hat{e}_{\text{elas}} \neq 0$ , например, если  $\mathbf{n}_{23} \parallel Y$ , то возникает компонента «заряда»  $(\hat{e}_{\text{elas}})_{xz} = -\sqrt{3}A_2$ , и стенка будет неелевского типа.

Особого внимания требует анализ пространственного распределения доменов. Как следует из всего предыдущего рассмотрения, если в кристалле возможно существование только двух типов АФМ доменов, отличающихся ориентацией АФМ осей, как, например, в кристаллах  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ , то «сэндвич», состоящий из периодически чередующихся через одну плоскопараллельных пластинок доменов 1 и 2, создает минимальные внутренние напряжения, локализованные либо внутри границ раздела, либо вблизи поверхности образца в слое порядка периода ДС. Если же возможно существование трех и более типов доменов, как в АФМ  $\text{CoCl}_2$ ,  $\text{NiO}$ ,  $\text{KCoF}_3$ , и т.п., то возникает вопрос об альтернативной структуре, например такой, в которой каждый домен имеет форму треугольной призмы. В подобной структуре границы раздела доменов по-прежнему не создают дополнительных напряжений, однако в области стыка трех доменов должна возникнуть, согласно [24–26], дисклинация, которая, в свою очередь, создает логарифмически спадающие с расстоянием поля дополнительных деформаций, неизбежно повышающих энергию кристалла в целом.

Рассмотрим подробнее возникновение дисклинации и создаваемые ею поля на примере ромбоэдрического АФМ типа  $\text{CoCl}_2$ . Когерентное сопряжение доменов 2 и 3 вдоль плоскости с  $\mathbf{n}_{23} \parallel X$  возможно только при наличии наряду с деформацией малого поворота, определяемого вектором  $\omega$ , направленным вдоль главной оси кристалла:

$$\omega_z = e_{xyz} \Delta u_{xy} n_x^2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Lambda_1, \quad (30)$$

где  $\Delta u_{xy}$  определено в (29). В случае, если соседствуют только два домена и граница раздела бесконечна, то относительный поворот кристаллических осей не вызывает дополнительных напряжений. Однако при стыке уже трех доменов за счет поворота каждого из них в ненапряженном кристалле должен возникнуть дефект, называемый дисклинацией (недостаточная или наоборот, избыточная плотность вещества, имеющая форму клина, см. рис. 1).

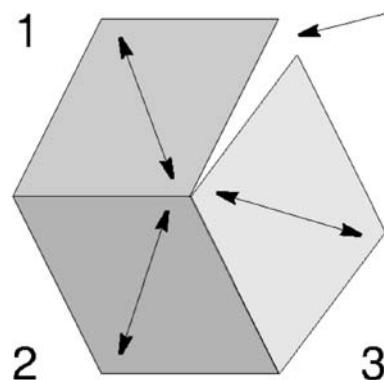


Рис. 1. Дисклинация в месте стыка трех доменов в кристалле типа  $\text{CoCl}_2$ . Обоюдоострые стрелки соответствуют направлениям АФМ векторов в каждом из доменов. Стрелка указывает клиновидный разрыв, связанный с поворотами каждого из доменов при переходе в магнитоупорядоченное состояние.

В идеальной решетке без разрывов отсутствие такого дефекта компенсируется напряжениями, необходимыми, чтобы «сшить» стороны клина. Предположим, что домены 1, 2 и 3 граничат друг с другом вдоль плоскостей, перпендикулярных трем осям симметрии 2-го порядка, и все три плоскости пересекаются вдоль линии, параллельной оси  $Z$ . Поскольку доменные стенки являются наевскими, стык является краевой дисклинацией [25,26]. Вектор Франка  $\Omega$  для этой дисклинации определяется как сумма векторов поворотов на каждой из границ раздела, взятых с обратным знаком:

$$\Omega_z = \frac{3\sqrt{3}}{2} \Lambda_1. \quad (31)$$

Знак вектора  $\Omega$  определяется знаком константы магнитострикции. По принятому соглашению [26], отрицательная величина  $\Omega$  соответствует недостатку вещества (см. рис. 1). Как видно из формулы (31), рассматриваемое трехдоменное сочленение порождает дисклинации только одного знака.

Общая формула для поля деформаций такой «отдельной дисклинационной линии» была выведена в работе [26]. Подставляя в нее выражение (31), получаем в цилиндрических координатах  $\rho, \Theta$ :

$$\begin{aligned} u_{xx}^{\text{disc}} + u_{yy}^{\text{disc}} &= \frac{3\sqrt{3}\Lambda_1(c_{66} - 2c_{12})}{4\pi(c_{66} - c_{12})} (\ln \rho + 2), \\ u_{xx}^{\text{disc}} - u_{yy}^{\text{disc}} &= -\frac{3\sqrt{3}\Lambda_1 c_{66}}{8\pi(c_{66} - c_{12})} \cos 2\Theta, \\ 2u_{xy}^{\text{disc}} &= -\frac{3\sqrt{3}\Lambda_1 c_{66}}{8\pi(c_{66} - c_{12})} \sin 2\Theta. \end{aligned} \quad (32)$$

Сравнение формул (28) и (32) показывает, что наличие стыка приводит к возникновению дополнительных деформаций, имеющих тот же порядок величины, что и спонтанные магнитострикционные деформации. Изоморфная часть (первое выражение в (32)) логарифмически зависит от расстояния  $\rho$  до дисклинации. Сдвиговая компонента (второе выражение в (32)) вообще не зависит от расстояния, но зависит от направления и вследствие магнитоупругих взаимодействий может менять локальные поля магнитной анизотропии и приводить к существенно неоднородному распределению АФМ векторов вокруг дисклинации. Наличие подсистемы дисклинаций может привести к частичной компенсации сдвиговых компонент, но тем не менее связано с возникновением неустранимых изоморфных деформаций, вклад которых в энергию за счет дальнодействующего характера пропорционален объему образца, и потому представляется энергетически менее выгодным, нежели регулярная структура, состоящая из пар доменов разного типа. При наложении внешнего поля незакрепленные дисклинации, будучи топологическими дефектами, должны стремиться выйти на поверхность. (Заметим, что в рассмотренном примере процессы аннигиляции дисклинаций исключены, поскольку все дисклинации имеют одинаковый знак.) В случае, если дисклинации закреплены дефектами другого типа (например, примесные атомы, вакансии и т.п.), их положение под действием внешнего поля не изменяется, однако за счет смещения доменных границ может измениться распределение дополнительных деформаций (32), создаваемых дисклинацией. После снятия внешних воздействий закрепленные дисклинации могут служить зародышами для образования доменов определенного типа и, таким образом, так же, как и «упругие заряды» на поверхности кристалла, обеспечивать обратимое поведение ДС во внешнем магнитном поле.

## 7. Выводы

Предложенная в настоящей работе модель для описания возникновения равновесной и обратимой ДС в АФМ и веществах, испытывающих фазовые переходы, которые сопровождаются существенными спонтанными сдвиговыми деформациями, основана на предположении об особых магнитных, упругих и магнитоупругих свойствах поверхности кристалла, отличных от его объемных свойств, что может быть связано как с размерными эффектами, так и с дефектами на поверхности. Абсолютно или достаточно жесткая

поверхность создает фиктивные «упругие заряды» несовместности. Эти заряды служат источниками дальнодействующих полей напряжений, аналогичных полям размагничивания в ферромагнетиках, приводящим к появлению ДС. Вклад в энергию от такого рода полей пропорционален объему образца, поскольку величина поля уменьшается обратно пропорционально расстоянию до «заряда». Следовательно, возникновение ДС связано с существенным понижением полной энергии кристалла. Повышение же энергии за счет вклада доменных стенок для макроскопических образцов (толщина которых превышает оптимальный период ДС) существенно меньше выигрыша за счет образования неоднородного состояния, и это обуславливает термодинамическую устойчивость ДС. Внешнее магнитное поле приводит к обратимой перестройке ДС, причем в низкополевой области зависимость макроскопических характеристик кристалла от отношения  $H/H_{MD}$  должна носить универсальный характер (закон соответственных состояний [20]). Характерное поле монодоменизации образца определяется величиной константы магнитострикции, а его зависимость от температуры — структурой поля напряжений, содержанием дефектов (в том числе, в парамагнитной фазе) и, возможно, предысторией образца. В идеальном (бездефектном) кристалле предпочтительнее образование регулярной полосовой структуры, состоящей из чередующихся доменов двух типов. Возникновение стыков трех и более доменов вызывает образование дисклинации, создающей дальнодействующие поля напряжений и повышающей, таким образом, энергию кристалла. Детали морфологии доменных границ, их движение в процессах монодоменизации и возникновение ДС при фазовых переходах было бы полезно и интересно изучить визуальными магнитооптическими методами, развитыми и опробованными В. В. Еременко с сотрудниками. Это позволило бы подтвердить (либо опровергнуть) развитую модель, а также сделать более точные выводы о природе ДС в АФМ.

Выражаем признательность В. Г. Барьяттару, М. А. Иванову и С. М. Рябченко за многочисленные плодотворные дискуссии по проблемам механизма образования ДС в АФМ. Е.В.Г. признателна А. А. Малышенко за техническую и финансовую поддержку.

Работа выполнена в рамках проекта, финансируемого Министерством образования Украины (госрегистрация № 0100U002336), а также при частичной поддержке Фонда фундаментальных исследований Украины, проект Ф7/514-2001.

1. L. Néel *Proc. Intern. Conf. Theor. Physics, Kyoto and Tokyo Sci. Council Jpn*, Tokyo (1954).
2. М. М. Фарзтдинов, УФН **84**, 611 (1964).
3. V. V. Eremenko and N. F. Kharchenko, *Sov. Sci. Rev. A* **5**, 1 (1984).
4. V. G. Bar'yakhtar, A. N. Bogdanov, and D. A. Yablonskii, *Sov. Phys. Usp.* **31**, 810 (1988).
5. A. Н. Богданов, И. Е. Драгунов, *ФНТ* **24**, 1136 (1998).
6. L. Néel, *J. Phys. Rad.* **5**, No. 241, 265 (1944).
7. В. М. Калита, А. Ф. Лозенко, С. М. Рябченко, П. А. Троценко, УФЖ **43**, 1469 (1998).
8. A. Janossy, F. Simon, T. Feher, A. Rockenbauer, L. Korecz, C. Chen, A. J. S. Chowdhury, and J. W. Hodby, *Phys. Rev. B* **59**, 1176 (1999).
9. В. М. Калита, А. Ф. Лозенко, С. М. Рябченко, *ФНТ* **26**, 671 (2000).
10. Е. В. Амитин, А. Г. Байкалов, А. Г. Блинов, Л. А. Боярский, В. Я. Диковский, К. Р. Жданов, М. Ю. Каменев, Л. П. Козеева, А. П. Шелковников, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 350 (1999).
11. Е. В. Гомонай и В. М. Локтев, *Fiz. Nizk. Temp.* **25**, 699 (1999).
12. Е. В. Гомонай и В. М. Локтев, *Acta Phys. Polonica* **A97**, 459 (2000).
13. В. В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию магнетиков*, Наукова думка, Киев (1971).
14. V. V. Eremenko, N. F. Kharchenko, and L. I. Beliy, *J. Appl. Phys.* **50**, 7751 (1979).
15. К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах*, Мир, Москва (1985).
16. В. И. Марченко, А. Я. Паршин, *ЖЭТФ* **79**, 257 (1980).
17. R. de Wit, *Solid State Phys.* **10**, 249 (1960).
18. Ch. Kittel, *Rev. Mod. Phys.* **21**, 541 (1949).
19. A. L. Roytburd, *J. Appl. Phys.* **83**, 228 (1998).
20. Е. В. Гомонай, В. М. Локтев, *ФНТ* **27**, 436 (2001).
21. M. Safa and B. K. Tanner *Philos. Mag.* **B37**, 739 (1978).
22. B. K. Tanner, *Contemporary Physics* **20**, 187 (1987).
23. J. Baruchel, M. Schlenker, and W. L. Roth, *J. Appl. Phys.* **48**, 5 (1977).
24. M. Kleman and M. Schlenker *J. Appl. Phys.* **43**, 7184 (1972).
25. M. Kleman *J. Appl. Phys.* **45**, 1377 (1974).
26. R. de Wit, *J. Phys.* **C5**, 529 (1972).

The possibility of formation and reconstruction  
of equilibrium domain structure in  
antiferromagnets

H. V. Gomonay and V. M. Loktev

The magnetoelastic interactions are shown to play a crucial role in the formation of an equilibrium domain structure in antiferromagnets with degenerate orientation of the easy magnetic anisotropy axis. Within the framework of phenomenologic theory and nonlinear elasticity methods, we have demonstrated that the surface of a crystal can be a source of imaginary incompatibility «elastic charges». These charges are similar to the magnetostatic charges which appear at the surface of ferromagnets and result in creation of domains. The crystal surface is considered as a peculiar phase with its own magnetic, elastic and magnetoelastic properties. The «elastic charges» produce long-range fields that contribute to the «stray» energy of the crystal, which is responsible for the formation of the equilibrium domain structure. This structure is actually the restoration of the initial global symmetry of the crystal in case the phase transformation accompanied by spontaneous symmetry breaking is described by the order parameter related to the shear strain. The conditions of the absence of «elastic charges» inside the sample set certain restrictions on the morphology of the magnetoelastic domain structure in antiferromagnets. The origin and effects of disclinations at junction of three domains are also discussed.