

## Модель дипольного магнетика для $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$

А. Г. Андерс, В. С. Бондаренко

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,  
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47  
E-mail: aanders@ilt.kharkov.ua*

С. Б. Бордовский

*Харьковский государственный университет, Украина, 310024, г. Харьков, пл. Свободы, 4*

А. Фегер, А. Орендачева

*Faculty of Science, P. J. Safarik University, Park Angelinum, 9, 04154 Kosice, Slovakia*

Статья поступила в редакцию 24 февраля 1997 г., после переработки 13 июня 1997 г.

В чисто дипольном приближении рассчитаны энергии упорядоченного состояния редкоземельной подсистемы  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  и определена магнитная конфигурация, соответствующая основному состоянию. Проведен расчет температурной зависимости магнитной теплоемкости в области  $T > T_N$ . Получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

В чисто дипольному наближенні розраховано енергії впорядкованого стану рідкісноземельної підсистеми  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  та визначено магнітну конфігурацію, яка відповідає основному стану. Проведено розрахунок температурної залежності магнітної теплоємності в області  $T > T_N$ . Отримано задовільну згоду з експериментом.

PACS: 75.10.-b, 75.25.+z, 75.40.Cx

### Введение

Как известно, подавляющее большинство магнитных систем в теории и практике магнетизма описывается в обменном приближении, для которого диполь-дипольное взаимодействие учитывается как поправочное. Обратная же ситуация проанализирована явно недостаточно, хотя целый ряд магнитоконцентрированных соединений, в основном редкоземельных диэлектриков, в том числе и используемых в качестве рабочих тел для систем адиабатического размагничивания, проявляют свойства чисто дипольных систем. Это связано со значительной величиной одноузельного магнитного момента редкоземельных (РЗ) ионов и сравнительно большими межионными расстояниями в решетке, эффективно снижающими обменное взаимодействие в системе.

Исследования соединений  $\text{KEr}(\text{MoO}_4)_2$  [1,2] и  $\text{CsGd}(\text{MoO}_4)_2$  [3], входящих в группу двойных щелочно-редкоземельных молибдатов, продемонстрировали возможность описания их основных магнитных свойств в чисто дипольном приближении.

Родственное соединение  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ , согласно результатам предыдущих исследований электронного парамагнитного резонанса [4] и магнитной теплоемкости [5], по-видимому, может также быть отнесено к дипольным магнетикам. Действительно, довольно высокие значения ( $\sim 10\mu_B$ ) одноузельных магнитных моментов ионов  $\text{Dy}^{3+}$  в этом кристалле, низкое значение температуры перехода в магнитоупорядоченное состояние  $T_N = 1,294$  К, сравнимое с энергией диполь-дипольных взаимодействий в системе, а также близость характера температурного поведения теплоемкости в районе  $T_N$  к теплоемкости двумерного изинговского магнетика могут свидетельствовать о доминирующем диполь-дипольном вкладе в общую картину спин-спиновых взаимодействий и в этом случае.

Целью настоящей работы является описание магнитных свойств  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  в дипольном приближении. При этом будет определена спиновая конфигурация, соответствующая основному состоянию в магнитоупорядоченной фазе, полученные энергетические соотношения, характеризую-

щие межионные взаимодействия, и рассчитана температурная зависимость магнитной теплоемкости выше точки магнитного упорядочения.

### Магнитная структура основного состояния $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$

При комнатных температурах кристаллографическая структура  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  соответствует пространственной группе  $D_{2h}^3$  с параметрами ячейки  $a = 9,51 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,97 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,05 \text{ \AA}$ , содержащей две формульные единицы этого соединения.

Координаты РЗ ионов в единицах параметров ячейки составляют  $x = 0$ ,  $y = 0,25$ ,  $z = 0$  (рис. 1).

При понижении температуры кристалл испытывает ряд структурных фазовых переходов, наиболее изученным из которых является переход I рода при температуре  $T \approx 40 \text{ К}$ . В результате в диапазоне гелиевых температур, который будет интересовать нас в данном исследовании, наблюдается, как минимум, удвоение объема элементарной ячейки, сопровождаемое понижением ее симметрии и образованием неэквивалентных центров размещения РЗ ионов [6]. Однако в спектре ЭПР  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  эта неэквивалентность выражается в симметричных относительно ромбических осей разворота тензоров эффективного  $g$ -фактора, характеризующего резонансное поглощение на нижайшем крамерсовом дублете основного термина

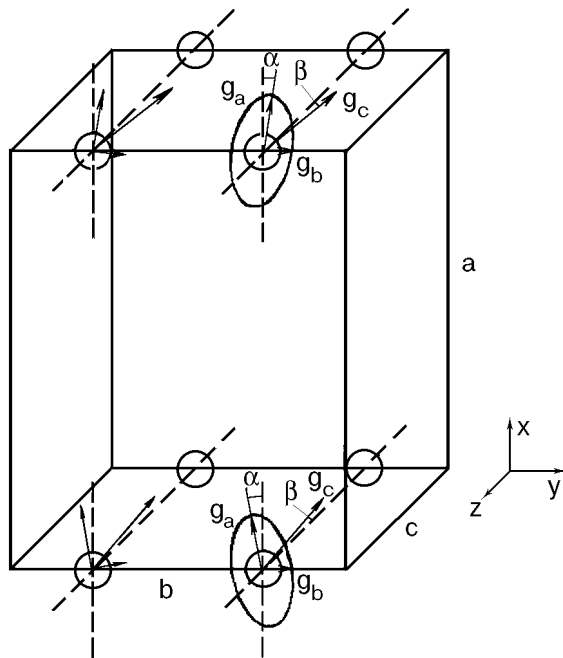


Рис. 1. Расположение ионов  $\text{Dy}^{3+}$  в ячейке  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  (стрелками показаны возможные направления осей  $g$ -тензоров неэквивалентных центров).

${}^6\text{H}_{15/2}$  ионов  $\text{Dy}^{3+}$ , расщепленного внутрискристаллическим полем. При этом сами экстремальные значения эффективного  $g$ -фактора для обоих центров оказываются равными, а величина углов разворота главных осей тензоров невелика и составляет соответственно  $\pm 10^\circ$  и  $\pm 5^\circ$  в плоскостях  $ab$  и  $bc$  ромбической фазы.

Столь незначительные различия параметров РЗ узлов позволяют считать их в первом приближении магнитоэквивалентными. В свою очередь, при анализе магнитной структуры это обстоятельство допускает рассмотрение единичной ячейки, содержащей один РЗ узел и в данном случае имеющей вдвое меньший объем из-за сокращения вдвое параметра  $b$ .

Метод определения магнитной структуры основного состояния в случае одного иона на элементарную ячейку был предложен Люттинджером и Тисса для классических дипольных систем [7] и обобщен Нимейером на случай квантовых систем [8]. Эта методика активно использовалась для определения минимальной дипольной энергии ряда парамагнитных солей [8,9], а также упоминавшихся выше молибдатов.

Суть метода состоит в следующем. Гамильтониан взаимодействий магнитных моментов, расположенных в узлах  $i$  и  $j$  кристаллической решетки, записывается как

$$H_D = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[ \mu_i \mu_j - 3 \frac{(\mu_i r_{ij})(\mu_j r_{ij})}{r_{ij}^2} \right], \quad (1)$$

где  $r_{ij}$  — радиус-вектор, соединяющий узлы  $i$  и  $j$ . Учитывая связь между компонентами магнитного момента и спина

$$\mu_i^\alpha = \sum_{\beta} \mu_B g_i^{\alpha\beta} S_i^\beta, \quad \alpha, \beta = x, y, z, \quad (2)$$

где  $\mu_B$  — магнетон Бора, гамильтониан (1) можно представить в виде

$$H_D = \sum_{i < j} \sum_{\alpha, \beta} P_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (3)$$

где

$$P_{ij}^{\alpha\beta} = \sum_{\epsilon, \lambda, \nu} \frac{\mu_B^2}{r_{ij}^3} \left( g_i^{\epsilon\alpha} g_j^{\epsilon\beta} - 3 \frac{g_i^{\alpha\lambda} g_j^{\beta\nu} r_{ij}^\lambda r_{ij}^\nu}{r_{ij}^2} \right). \quad (4)$$

Тензор  $\hat{g}$  диагонален в координатной системе ячейки и не зависит от положения узлов  $i$  и  $j$ .

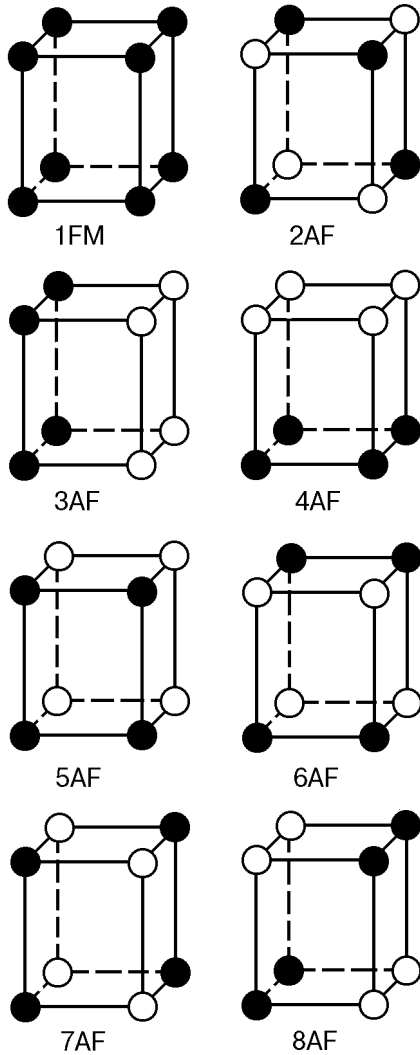


Рис. 2. Упорядоченные магнитные структуры по Нимейеру [8] (светлые и темные узлы соответствуют противоположным направлениям моментов).

Согласно теореме Нимейера, магнитная структура основного состояния в случае одного иона на элементарную ячейку должна соответствовать одному из восьми возможных вариантов, обладающих минимальной энергией момента  $\mu_i$  в поле окружающих моментов. На рис. 2 изображены ферромагнитная 1FM, неелевская антиферромагнитная 2AF и шесть типов слоистых антиферромагнитных структур.

\* Предварительный анализ сходимости собственных значений  $\epsilon_k^\alpha$  при увеличении числа координационных сфер, участвующих в суммировании, показал, что в указанном случае даже удвоение величины радиуса приводит к изменениям величин  $\epsilon_k^\alpha$ , не превышающим 0,1% от исходного значения. Поэтому именно эта оценка приведена в качестве погрешности результатов вычислений  $E_k^\alpha$ .

Расчет собственных значений энергии диполь-дипольного взаимодействия этих состояний связан с использованием матриц третьего порядка

$$A_k = \sum_{i < j} q(k) P_{ij}^{\alpha\beta}, \quad k = 1, \dots, 8, \quad (5)$$

которые с учетом (3) и (4) приобретают вид

$$A_k = \sum_{l,m,n} q(k) \begin{pmatrix} g_x^2 \frac{r^2 - 3x^2}{r^5} & -3 \frac{g_x g_y x y}{r^5} & -3 \frac{g_x g_z x z}{r^5} \\ -3 \frac{g_x g_y x y}{r^5} & g_y^2 \frac{r^2 - 3y^2}{r^5} & -3 \frac{g_y g_z y z}{r^5} \\ -3 \frac{g_x g_z x z}{r^5} & -3 \frac{g_y g_z y z}{r^5} & g_z^2 \frac{r^2 - 3z^2}{r^5} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{r} \equiv \{x, y, z\} = \{la, mb/2, nc\}$ . В соответствии с рис. 2 конфигурационную часть  $q(k)$  можно представить в виде

$$\begin{aligned} q(1) &= 1; & q(5) &= (-1)^n; \\ q(2) &= (-1)^{l+m+n}; & q(6) &= (-1)^{l+n}; \\ q(3) &= (-1)^m; & q(7) &= (-1)^{m+n}; \\ q(4) &= (-1)^l; & q(8) &= (-1)^{l+m}. \end{aligned} \quad (7)$$

Учитывая, что  $\langle (S^\alpha)^2 \rangle = S(S+1)/3$ , для гамильтониана (3) получаем собственные значения энергии

$$E_k^\alpha = \frac{1}{3} \mu_B^2 S(S+1) \epsilon_k^\alpha, \quad (8)$$

где  $\epsilon_k^\alpha$  — собственные значения матрицы  $A_k$ . Они вычислялись при прямом суммировании элементов матрицы (6) по сфере радиусом  $475 \text{ \AA}$ , что обеспечило погрешность результатов, не превышающую 0,1% при умеренных затратах машинного времени\*. При этом использовались решеточные параметры высокотемпературной фазы  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ , поскольку, судя по результатам dilatометрических исследований [10], различия в параметрах решетки при 4,2 и 300 К не превышают 0,1%. Результаты расчета приведены в таблице и схематически отображены на рис. 3.

Минимальное значение энергии при  $E_8 = -1,3390 \text{ К}$  соответствует конфигурации 8AF с направлением магнитных моментов вдоль оси  $c$  при максимальном значении проекции эффективного  $g$ -фактора ( $g_a = 3,7$ ;  $g_b = 1$ ;  $g_c = 13,4$  [4]).

Энергетически вплотную к ней расположена конфигурация 3AF, для которой моменты также ориентированы в направлении оси *c*. При этом энергетические характеристики этих состояний различаются незначительно:  $E_3 - E_8 = 0,0044$  К. Эта величина может служить оценкой энергии междоузельной связи в основном состоянии  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ , которая гораздо меньше, чем энергия связи в цепочке  $E_8 = 1,339$  К.

Таблица

Собственные значения энергий спиновых конфигураций упорядоченного состояния  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  с различным направлением моментов

Магнитная конфигурация	Энергия, К		
	$E_a/k_B$	$E_b/k_B$	$E_c/k_B$
1FM	1,1048	0,0488	-1,2285
2AF	-0,0702	0,0101	-0,3041
3AF	-0,0543	0,0130	-1,3346
4AF	0,2657	-0,0069	-0,8322
5AF	0,0059	-0,0143	2,0852
6AF	0,0150	-0,0134	1,9751
7AF	-0,0709	1,0733	-0,3011
8AF	-0,0522	0,0123	-1,3390

Энергетически выше расположена конфигурация 1FM, превышающая энергию основного состояния на  $\approx 0,11$  К, при ориентации моментов вдоль оси *c*. Обычно кристаллы  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  имеют вид тонких пластин (ось *a* перпендикулярна плоскости пластины), поэтому при расчете энергий чисто ферромагнитной структуры 1FM размагничивающий фактор учитывался лишь в направлении оси *a*, он изменяет энергию системы на величину  $\Delta E = 2\pi \mu_B^2 g_a^2 S^2 n_0$ , что составило  $\Delta E = 0,0667$  К при плотности ионов  $\text{Dy}^{3+}$  в  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$   $n_0 = 4,98 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ .

Из результатов расчета следует, что энергия антиферромагнитных структур с ориентацией моментов перпендикулярно «легкой» оси *c* оказывается выше, чем энергия ферромагнитной структуры 1FM с направлением моментов вдоль оси *c* (рис. 3). Это означает, что в основном состоянии во внешнем магнитном поле  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$  система должна миновать энергетически невыгодное спин-флоп состояние, вместо которого будет реализовываться метамагнитный фазовый переход в ферромагнитную фазу. В этом случае поле перехода будет определяться разностью энергий фаз 1FM ( $\mu \parallel \mathbf{c}$ ) и 8AF ( $\mu \parallel \mathbf{c}$ ), что составляет

$$H = k_B(E_1 - E_8)/g_c \mu_B S = 245,4 \text{ Э}.$$

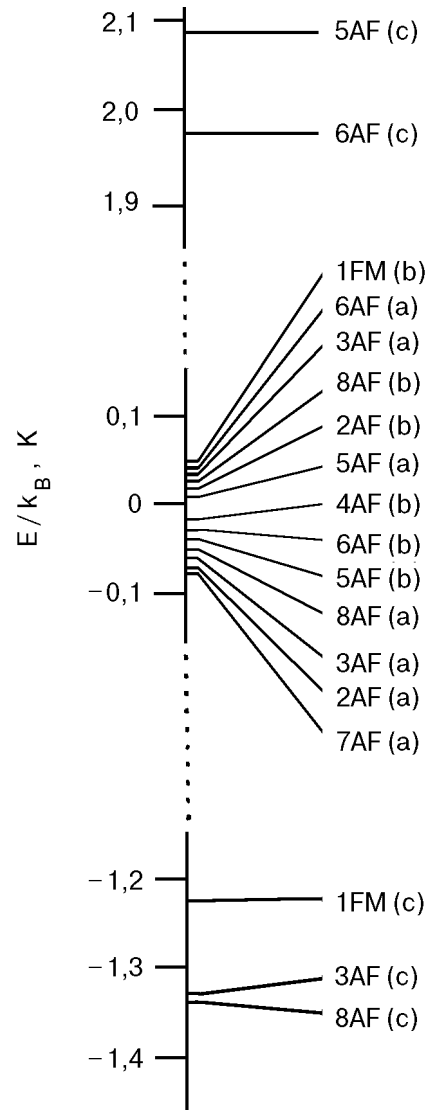


Рис. 3. Энергетическая шкала магнитных конфигураций упорядоченного состояния  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  (в скобках указано направление магнитных моментов).

Результаты экспериментов [11] по исследованию зависимости намагниченности  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  от внешнего магнитного поля, проводившихся при  $T \approx 0,5$  К, демонстрируют при  $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$  резкое возрастание магнитного момента системы в районе  $H_c \approx 300$  Э до номинального значения, которое при дальнейшем возрастании поля до  $\approx 50$  кЭ остается постоянным. Такое поведение намагниченности качественно соответствует нашему выводу о наличии метамагнитного фазового перехода в этой системе.

### Магнитная теплоемкость

Количественный анализ теплоемкости магнитной системы может служить проверкой правильности модели взаимодействия, выбранной для описания свойств исследуемого кристалла. При

этом широко используется метод высокотемпературного разложения функции распределения. Несмотря на то что вычисление коэффициентов высокого порядка в разложении становится в значительной степени трудоемкой задачей, этот метод широко использовался для описания магнитной теплоемкости и магнитной восприимчивости ряда систем с доминирующим диполь-дипольным взаимодействием даже в области температур близких к  $T_N$  [12,13]. При этом удовлетворительное согласие с экспериментом удавалось получить при учете первых двух-трех членов разложения.

Для случая дипольных систем с гамильтонианом (3) разложение статистической суммы

$$Z = \text{Sp} \left( e^{-\frac{H_D}{k_B T}} \right) \quad (9)$$

по степеням обратной температуры приводит к ряду вида

$$Z = \text{Sp} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{H_D}{k_B T} \right)^n. \quad (10)$$

Учитывая соотношение между потенциалом Гиббса  $G(T) = -k_B T \ln Z$  и теплоемкостью  $c_m = -T (\partial^2 G / \partial T^2)_{H=0}$ , можно получить выражение для  $c_m(T)$  также в виде ряда по степеням обратной температуры:

$$\frac{c_m}{R} = \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{b_n}{T^n}, \quad (11)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная. Общий вид коэффициентов  $b_2$  и  $b_3$  для дипольных систем представлен в [12,13].

Согласно данным по ЭПР [4],  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  характеризуется существенной анизотропией  $g$ -фактора ( $g_c \gg g_a, g_b$ ). Поэтому в рассмотренном нами случае при вычислении коэффициентов  $b_n$  можно пренебречь членами, содержащими  $(g_b^2)^n$  и  $(g_a g_b)^n$ . Конкретные выражения для  $b_2$  и  $b_3$ , использованные нами для расчета теплоемкости, приведены в приложении.

На рис. 4 представлена температурная зависимость магнитной теплоемкости  $c_m(T)$  при  $T > T_N$ , полученная путем вычитания из полной теплоемкости  $c_{\text{tot}}$  [5] решеточного вклада  $c_{\text{lat}}$ :  $c_m = c_{\text{tot}} - c_{\text{lat}}$ . Сплошная линия соответствует расчету  $c_m$  по выражению (11) при учете только члена с  $b_2$ . Учет второго члена с коэффициентом  $b_3$  не приводит к лучшему совпадению с экспериментальными значениями, поскольку этот член входит в разложение (11) с отрицательным зна-

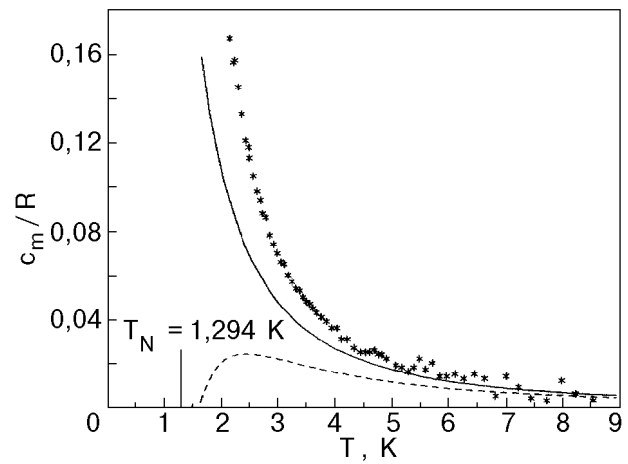


Рис. 4. Температурная зависимость магнитной теплоемкости  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ : эксперимент (\*); расчет с учетом первого члена разложения (11) (—); расчет с учетом первых двух членов разложения (11) (---).

ком. Можно полагать, что учет члена с  $b_4$ , а также членов более высокого порядка будет способствовать лучшему описанию экспериментальных значений, однако задача становится гораздо более трудоемкой из-за сложного вида коэффициентов  $b_n$  и большого количества решеточных сумм. Тем не менее даже при учете только первого члена разложения (11) наблюдается довольно хорошее совпадение расчетной кривой с экспериментальными данными.

## Выводы

Как и для ранее исследованных двойных щелочно-редкоземельных молибдатов  $\text{KEr}(\text{MoO}_4)_2$  и  $\text{CsGd}(\text{MoO}_4)_2$  с большой величиной магнитного момента редкоземельных ионов, основные магнитные свойства  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  могут быть описаны в предположении о преимущественном диполь-дипольном характере спин-спиновых взаимодействий в системе. Существующие расчетные приемы позволяют выбрать магнитную конфигурацию основного состояния в магнитоупорядоченной фазе дипольного магнетика и на основании энергетических оценок предсказать ее основные свойства. В частности, магнитная структура  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  в основном состоянии состоит из ферромагнитных цепочек ионов  $\text{Dy}^{3+}$ , расположенных и ориентированных вдоль оси  $c$  кристалла, с максимальной величиной проекции  $g$ -фактора. Магнитные моменты соседних цепочек ориентированы навстречу друг другу.

Заметим, что используемая методика расчета, фактически представляющая собой метод среднего поля, действительно приводит к значению энергии для конфигурации, соответствующей ос-

новному состоянию и выраженной в кельвинах, весьма близкому к значению  $T_N$  кристалла, являющейся мерой внутренних взаимодействий в системе.

Энергия межцепочечной связи оказывается значительно меньше энергии связи магнитных моментов в цепочке, что в сочетании с довольно устойчивым минимумом энергии для ориентации моментов  $\mu \parallel c$  позволяет рассматривать  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  как квазиодномерный изинговский магнетик, для которого характерно наличие метамгнитного фазового перехода во внешнем магнитном поле, ориентированном вдоль направления моментов. Экспериментальные исследования поведения намагниченности кристалла качественно соответствуют этому выводу.

Наконец, оказывается возможным описание магнитной составляющей теплоемкости  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  без привлечения дополнительных типов межионных взаимодействий. Все это подтверждает качественную применимость дипольной модели магнетика для исследуемой системы.

### Приложение

Поскольку для систем с чисто диполь-дипольным взаимодействием в  $\text{Sp}(H_D^2)$  входят только члены вида  $\sum_{ij} P_{ij}^{\alpha\beta} P_{ij}^{\alpha\beta}$ , а в  $\text{Sp}(H_D^3)$  — вида

$\sum_{ij,jk,ki} P_{ij}^{\alpha\beta} P_{jk}^{\alpha\beta} P_{ki}^{\alpha\beta}$  и  $\sum_{ij} P_{ij}^{\alpha\beta} P_{ij}^{\alpha\beta} P_{ij}^{\alpha\beta}$ , коэффициенты  $b_2$  и  $b_3$  будут выглядеть как

$$b_2 = \frac{1}{18k^2} S^2(S+1)^2 \mu_B^2 \{ g_x^4 (S_1 - 6S_3 + 9S_7) + g_z^4 (S_1 - 6S_4 + 9S_8) + 18g_z^2 (g_x^2 S_9 + g_y^2 S_{10}) \};$$

$$b_3 = \frac{1}{6k^2} S^2(S+1)^2 \mu_B^2 \{ g_x^6 (S_2 - 9S_5 + 27(S_{11} - S_{13})) + g_z^6 (S_2 - 9S_6 + 27(S_{12} - S_{14})) - 54g_z^3 (g_x^3 S_{15} + g_y^3 S_{16}) \} + \frac{1}{9k^3} S^3(S+1)^3 \mu_B^3 \{ g_x^6 (S_{17} - 3(2S_{18} + S_{20})) + 9(2S_{22} + S_{24}) - 27S_{26} \} + g_z^6 (S_{17} - 3(2S_{19} + S_{21})) + 9(2S_{23} + S_{25}) - 27S_{27} - 54g_z^3 (g_x^3 S_{28} + g_y^3 S_{29}) \},$$

где  $S_n$  — решеточные суммы следующих типов:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{ij} \frac{1}{r_{ij}^6}; & S_2 &= \sum_{ij} \frac{1}{r_{ij}^9}; & S_3 &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^8}; \\ S_4 &= \sum_{ij} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^8}; & S_5 &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^{11}}; & S_6 &= \sum_{ij} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^{11}}; \\ S_7 &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^{10}}; & S_8 &= \sum_{ij} \frac{z_{ij}^4}{r_{ij}^{10}}; & S_9 &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^2 z_{ij}^2}{r_{ij}^{10}}; \\ S_{10} &= \sum_{ij} \frac{y_{ij}^2 z_{ij}^2}{r_{ij}^{10}}; & S_{11} &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^4}{r_{ij}^{13}}; & S_{12} &= \sum_{ij} \frac{z_{ij}^4}{r_{ij}^{13}}; \\ S_{13} &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^6}{r_{ij}^{15}}; & S_{14} &= \sum_{ij} \frac{z_{ij}^6}{r_{ij}^{15}}; & S_{15} &= \sum_{ij} \frac{x_{ij}^3 z_{ij}^3}{r_{ij}^{15}}; \\ S_{16} &= \sum_{ij} \frac{y_{ij}^3 z_{ij}^3}{r_{ij}^{15}}; & S_{17} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{1}{r_{ij}^3 r_{jk}^3 r_{ki}^3}; \\ S_{18} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{ij}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^3 r_{ki}^3}; & S_{19} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^3 r_{ki}^3}; \\ S_{20} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{jk}^2}{r_{ij}^3 r_{jk}^5 r_{ki}^3}; & S_{21} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{z_{jk}^2}{r_{ij}^3 r_{jk}^5 r_{ki}^3}; \\ S_{22} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{ij}^2 x_{jk}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^3}; & S_{23} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{z_{ij}^2 z_{jk}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^3}; \\ S_{24} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{ij}^2 x_{ki}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^3 r_{ki}^5}; & S_{25} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{z_{ij}^2 z_{ki}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^3 r_{ki}^5}; \\ S_{26} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{ij}^2 x_{jk}^2 x_{ki}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^5}; & S_{27} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{z_{ij}^2 z_{jk}^2 z_{ki}^2}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^5}; \\ S_{28} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{x_{ij} x_{jk} x_{ki} z_{ij} z_{jk} z_{ki}}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^5}; \\ S_{29} &= \sum_{ij,jk,ki} \frac{y_{ij} y_{jk} y_{ki} z_{ij} z_{jk} z_{ki}}{r_{ij}^5 r_{jk}^5 r_{ki}^5}. \end{aligned}$$

Численные значения  $S_n$  получены путем прямого суммирования по мере увеличения числа координационных сфер, участвующих в суммировании. Машинная программа прекращала процесс вычисления, когда разность последующего и предыдущего результатов суммирования оказывалась менее 1% от предыдущего значения суммы.

1. А. Г. Андерс, С. В. Волоцкий, О. Э. Зубков, *ФНТ* **20**, 131 (1994).
2. А. Г. Андерс, С. В. Волоцкий, О. Э. Зубков, *ФНТ* **20**, 137 (1994).
3. А. Г. Андерс, С. В. Волоцкий, С. В. Старцев, А. Фегер, А. Орендачева, *ФНТ* **21**, 52 (1995).
4. А. Г. Андерс, В. С. Бондаренко, *ФНТ* **22**, 1042 (1996).
5. П. Штефани, А. Орендачева, А. Фегер, Э. Е. Андерс, А. И. Звягин, *ФНТ* **15**, 1105 (1989).
6. Н. М. Нестеренко, В. И. Фомин, В. И. Кутько, А. И. Звягин, *Препринт*, 26–82, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1982).
7. J. M. Luttinger and L. Tisza, *Phys. Rev.* **70**, 954 (1946).
8. T. Niemeier, *Physica* **57**, 281 (1972).
9. J. M. Daniels and J. Felsteiner, *Can. J. Phys.* **42**, 1469 (1964).
10. С. Б. Феодосьев, Е. С. Сыркин, И. А. Господарев, В. П. Попов, А. А. Гуркаас, Н. М. Нестеренко, *ФТТ* **31**, вып. 1, 186 (1989).
11. А. С. Черный, *Магнитные свойства двойных молибдатов диспрозия и эрбия*, Дисс. ... канд. физ.-мат. наук, ФТИНТ НАНУ, Харьков (1994).
12. S. Wong, S. T. Dembinski, and W. Opechowski, *Physica* **42**, 565 (1969).
13. E. Lagendijk, H. W. L. Blote, and W. J. Huiskamp, *Physica* **61**, 220 (1972).
14. C. D. Marquart, *Proc. Phys. Soc. London* **92**, 650 (1967).
15. P. H. E. Meijer and D. J. O'Keeffe, *Phys. Rev.* **B1**, 3786 (1970).

### Dipole magnetic model for CsDy(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

A. G. Anders, V. S. Bondarenko, S. B. Bordovsky,  
A. Feger, and A. Orendacheva

The ordered state energies of the rare-earth subsystem CsDy(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> are calculated in the pure dipole approximation. The magnetic configuration is found, which corresponds to the ground state. The temperature dependence of the magnetic heat capacity is calculated at  $T > T_N$ . The results obtained are in good agreement with experiment.