PACS: 64.70.Kb, 75.50.Cc

Л.С. Метлов<sup>1,2</sup>, В.Д. Пойманов<sup>2</sup>

## СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАТЕРИАЛАХ С КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

<sup>1</sup>Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина <sup>2</sup>Донецкий национальный университет

### Статья поступила в редакцию 10 января 2018 года

Структурные и магнитные фазовые переходы в материалах с кубической структурой рассмотрены на примере сплавов Гейслера и железо-иттриевого граната. Установлено, что структурный фазовый переход в сплавах Гейслера при понижении температуры и магнитный фазовый переход в железо-иттриевом гранате при уменьшении магнитного поля в состоянии насыщения протекают по одинаковому сценарию (трифуркация, полифуркация). Раскрыты флуктуационные механизмы таких переходов. Обнаружен эффект расщепления кривых намагниченности при структурном фазовом переходе. Структурный переход в железо-иттриевом гранате с ростом давления описан как фазовый переход первого рода от кубической симметрии к более высокой симметрии аморфного состояния.

Ключевые слова: структурный фазовый переход, магнитный фазовый переход, температура Кюри, температура мартенситного перехода, высокосимметричная фаза, низкосимметричная фаза, параметры порядка

## 1. Введение

Сплавы с кубической симметрией представляют важный класс перспективных конструкционных и функциональных материалов с широким спектром полезных свойств. Например, сплавы Гейслера, сочетающие магнитные свойства с эффектом памяти формы, являются объектом пристального внимания в связи с перспективами их практического применения [1–5]. Высокая чувствительность к магнитному полю этих сплавов позволяет более разнообразно управлять эффектом памяти формы, осуществляя последний без нагрева за счет инициирования структурного фазового перехода магнитным полем [6,7].

Другим соединением такого класса является сплав железо-иттриевого граната  $Y_3Fe_5O_{12}$ , который, несмотря на существование широкого класса магнитных материалов, а также открытие и изучение свойств новых соединений (интерметаллидов, графена, максенов и т.д.), по-прежнему остается одним из наиболее востребованных материалов с точки зрения его практического применения в микроволновых и магнитооптических устройствах [8–10]. Многообразие свойств, обусловленных многоподрешеточной структурой,

делает возможным конструирование на основе этих сплавов магнитных зондов, волноводов, резонаторов и т.п. с контролируемыми амплитудно-частотными характеристиками, спектром пропускания, кривой ферромагнитного резонанса и другими динамическими характеристиками.

В сплавах с кубической симметрией элементарной ячейки при изменении температуры или давления могут осуществляться структурные фазовые переходы по различным лучам звезды волнового вектора с формированием сложной разветвленной доменной структуры [11,12] или аморфизации [13]. Потеря симметрии может описываться многоминимумным потенциалом с переходом по сценарию трифуркации и сопровождаться флуктуационными переходами между различными минимумами. При наличии в элементарной ячейке магнитных атомов кубическая симметрия создает предпочтительные направления магнитного упорядочения, что может сопровождаться изменением характера этого упорядочения в зависимости от текущего структурного состояния.

Целью настоящей статьи является исследование особенностей многоминимумного потенциального рельефа свободной энергии и связанных с ними спонтанных и вынужденных фазовых переходов в сплавах с кубической элементарной ячейкой, а также анализ специфических структурных и магнитных явлений и эффектов, наблюдаемых в таких сплавах.

## 2. Структурные фазовые переходы в сплавах Гейслера

Сплавы Гейслера имеют кубическую структуру аустенита  $O_h$ . При температурах ниже температуры мартенситного перехода  $T_M$  эти сплавы переходят в низкосимметричную фазу мартенсита  $D_{4h}$ . Структурная часть свободной энергии, описывающей такой переход, представляет собой сумму инвариантов [4,14]:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}a\left(e_2^2 + e_3^2\right) + \frac{1}{3}be_3\left(e_3^2 - 3e_2^2\right) + \frac{1}{4}c\left(e_2^2 + e_3^2\right)^2, \qquad (1)$$

где  $e_2$ ,  $e_3$  – линейные комбинации компонент тензора деформации, ответственные за переход решетки из кубической фазы в тетрагональную:

$$e_2 = (e_{xx} - e_{yy})/\sqrt{2}, \quad e_3 = (2e_{zz} - e_{xx} - e_{yy})/\sqrt{6}.$$
 (2)

Деформация в данном случае является вторичным структурным параметром. Поскольку деформация безразмерна, все коэффициенты в (1) имеют одинаковую размерность.

Температурная зависимость осуществляется через коэффициент при второй степени структурного параметра порядка

$$a = a_0 \left( T - T_M \right), \tag{3}$$

где  $a_0$  – некоторая новая постоянная. Температура  $T_M$  является границей абсолютной устойчивости низкосимметричной фазы. При температурах выше  $T_M$  обе фазы (высоко- и низкосимметричная) существуют вместе. Интервал лабильности заканчивается в точке  $T_A$ , которая не задается явно в модельных коэффициентах, но может быть выражена через эти коэффициенты и температуру  $T_M$ :

$$T_A = T_M + \frac{1}{4} \frac{b^2}{ca_0}.$$
 (4)

При выбранных для расчетов параметрах модели  $T_M = 150$  K, b = 0.3,  $a_0 = 0.005$ , c = 1 интервал лабильности равен 6 K, и, соответственно,  $T_A = 156$  K.

Равновесные значения параметров порядка находятся из условий

$$\frac{\partial \Phi}{\partial e_2} = e_2 \left[ a - 2be_3 + c \left( e_2^2 + e_3^2 \right) \right] = 0,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial e_3} = ae_3 + be_3^2 - be_2^2 + ce_3 \left( e_2^2 + e_3^2 \right) = 0.$$
(5)

Отсюда видно, что нулевые значения параметров порядка  $e_2 = e_3 = 0$  всегда являются решениями системы (5). При температурах выше  $T_M$  нулевые решения устойчивы, ниже  $T_M$  – неустойчивы. Ненулевые решения

$$e_{2} = 0, \quad e_{3} = -\frac{1}{2c} \left( b + \sqrt{b^{2} - 4ac} \right),$$

$$e_{2} = \pm \sqrt{\frac{3}{4c} \left[ -a + \frac{b}{2c} \left( b + \sqrt{b^{2} - 4ac} \right) \right]}, \quad e_{3} = \frac{1}{4c} \left( b + \sqrt{b^{2} - 4ac} \right)$$
(6)

существуют при температурах ниже  $T_A$ . На интервале лабильности  $T_M - T_A$  одновременно существуют как нулевые, так и ненулевые решения системы (5). Потенциал (1) в плоскости  $e_2-e_3$  обладает симметрией правильного треугольника  $C_3$  относительно главной диагонали куба (рис. 1). Все три его минимума имеют одинаковую глубину (энергетическое вырождение) и соответствуют трем низкосимметричным состояниям с укорочением сторон куба элементарной ячейки по направлениям (1,0,0), (0,1,0) и (0,0,1) соответственно. Разные структурные домены будут сфор-



**Рис. 1.** Рельеф термодинамического потенциала при температуре  $T = T_M$ 

мированы одним из трех минимумов термодинамического потенциала.

Сечение потенциального рельефа вдоль радиуса в плоскости  $e_2-e_3$  в направлении минимума *I* (рис. 1) приведено на рис. 2,*a* для случая одинаковой глубины потенциальных ям в высоко- и низкосимметричной фазах. Температура  $T_{eq}$ , при которой ямы этих фаз имеют одинаковую глубину, равна

$$T_{\rm eq} = T_M + \frac{2}{9} \frac{b^2}{ca_0},$$
 (7)

т.е. лежит ближе к температуре  $T_A$ , чем  $T_M$ . Высота потенциального барьера  $\Phi_{MA}$ , разделяющего высоко- и низкосимметричное состояния, в этом случае будет равна

$$\Phi_{MA} = \frac{1}{324} \frac{b^4}{c^3} \,. \tag{8}$$



**Рис. 2.** Графики термодинамического потенциала: a – по радиусу в направлении минимума l (см. рис. 1) при температуре  $T_{eq}$ : 0, l – минимумы соответственно высоко- и низкосимметричной фаз, 2 – разделяющий их максимум;  $\delta$  – по окружности вокруг центра плоскости  $e_2-e_3$ , проходящему через минимумы низкосимметричной фазы l и через максимумы 2, разделяющие высоко- и низкосимметричные минимумы. Минимумам, пронумерованным на рис. 1, соответствуют углы  $\varphi$ :  $l - 180^\circ$ ,  $2 - 60^\circ$ ,  $3 - 300^\circ$ 

Выражение потенциального барьера содержит малый численный множитель. Кроме того, сам коэффициент *b* для сплавов Гейслера мал (узкий гистерезис). По этой причине потенциальный барьер может быть достаточно малым, чтобы мог быть преодолен за счет тепловых флуктуаций. В данной ситуации возможны спонтанные переходы между аустенитным и мартенситным состояниями, и наоборот (рис. 3).

В то же время потенциальный барьер, разделяющий различные мартенситные состояния, на порядок более высокий, чем потенциальный барьер между аустенитным и мартенситным состояниями. Это следует из сравнения с сечением потенциального рельефа по окружности вокруг центра плоскости  $e_2-e_3$ , выбранной с таким радиусом, чтобы она проходила через минимумы потенциала (кривая 1, рис. 2, $\delta$ ). Видно, что для прямого перехода из одного мартенситного состояния в любое другое необходимо преодолеть значительно более высокий барьер. Поэтому системе выгоднее из любого мартенситного минимума вначале попасть в аустенитное состояние (восстановив кубическую симметрию) и только потом перейти в один из трех мартенситных минимумов (трифуркация).



**Рис. 3.** Кинетика спонтанных (флуктуационных) переходов между различными минимумами потенциала в области лабильности при температуре 155 К: 1, 2, 3 – состояния, которые соответствуют минимумам свободной энергии на рис. 1; 0 – аустенитное состояние типа A

**Рис. 4.** Спонтанные (флуктуационные) переходы между различными минимумами свободной энергии при температуре 155 К на плоскости *e*<sub>2</sub>–*e*<sub>3</sub>

Для описания флуктуационных переходов и кинетики фазового перехода используются уравнения типа Ланжевена

$$\frac{\partial \eta_k}{\partial t} = \gamma_k \frac{\partial \Phi}{\partial \eta_k} + f_k(t) , \qquad (9)$$

полученные путем добавления случайных источников  $f_k(t)$  в эволюционные уравнения типа Ландау–Халатникова для каждого вида параметра порядка  $\eta = e_2, e_3$ . Случайные источники  $f_k(t)$ , моделирующие тепловые флуктуации, задаются в форме «белого шума».

Пример таких спонтанных переходов во времени при температуре  $T = T_A - 1$  К в области лабильности приведен на рис. 3, 4

Как следует из рис. 3, система длительное время пребывает в одном из четырех состояний, за короткое время случайным образом переходя между ними по сценарию, описанному выше. Из рис. 4 видно, что все переходы осуществляются через центр плоскости  $e_2-e_3$ , соответствующий нулевому значению параметра порядка, а прямые переходы между мартенситными минимумами маловероятны.

При охлаждении с некоторой постоянной скоростью из области температур выше обеих критических температур система попадает в одно из мартенситных состояний (рис. 5,*a*). При этом имеет место некоторое кинетическое опережение фазового перехода – высокосимметричное состояние «не доживает» до конца интервала лабильности в точке  $T_M$ , равной в нашем примере 150 К. Это может быть связано с тем, что при заданном уровне флуктуаций реальный переход осуществляется при температуре  $T_{eq}$ , которая согласно (4) и (7) лежит ближе к точке  $T_A$ , чем  $T_M$ . При более низком уровне тепловых флуктуаций высокосимметричное состояние может быть заморожено и способно дожить до температуры  $T_M$ . Отметим, что вследствие постоянства скорости охлаждения для изображения кинетических кривых вместо временной зависимости удобнее использовать температурную, поскольку сразу видно, насколько в данный момент текущая температура отстоит от критических точек.



**Рис. 5.** Температурные зависимости структурных параметров порядка при охлаждении (*a*) и нагреве ( $\delta$ ): кривые  $1 - для e_2$ , кривые  $2 - для e_3$ 

При нагреве низкосимметричное состояние также доживает до температуры  $T_{eq}$ , после чего система по сценарию рис. 3, 4 перескакивает в мартенситное состояние l (см. рис. 1), и только потом устанавливается в высокосимметричном состоянии (рис. 5, $\delta$ ). Получается, что при данном уровне тепловых флуктуаций гистерезис фактически отсутствует и фазовый переход проявляет себя как фазовый переход второго рода.

## 3. Структурные фазовые переходы в пленках железо-иттриевого граната

В обзоре [13] было указано на отличительную особенность феррит-граната – при давлении около 50 GPa его кристаллическая структура становится аморфной. При снятии давления данное аморфное состояние сохраняется вплоть до нормального, что свидетельствует о структурном фазовом переходе первого рода. В работе [15] обнаружено явление коллапса – исчезновение магнитной структуры вместе с аморфизацией пленки. Таким образом, индуцированный аморфизацией магнитный переход можно объяснить наличием магнитоупругой связи между кристаллической и магнитной подсистемами.

При комнатной температуре железо-иттриевый гранат имеет кубическую симметрию, и исчезновение структурного упорядочения в решетке при аморфизации хаотизирует направления магнитных моментов, что приводит к структурному (нетепловому) парамагнетизму. При снятии давления кристаллическая и магнитная структуры феррит-граната не восстанавливаются, и он остается структурно разупорядоченным и размагниченным. Особенностью процесса аморфизации является то, что достаточно высокосимметричная в нормальных условиях кубическая структура при компрессии переходит в еще более высокосимметричную неупорядоченную (аморфную) структуру. Обратный же переход осуществляется при низком либо даже отрицательном давлении.

Для описания структурного перехода при давлении выберем в качестве параметра порядка величину

$$\varphi = \frac{l/2 - d}{l},\tag{10}$$

где l – постоянная кубической решетки, d – размер области вокруг узла кристаллической решетки, в которой может находиться атом. Полагаем, что l не изменяется, а d возрастает до значения l/2, что сопровождается уменьшением параметра порядка до нуля.

Считая температуру фиксированной, структурную часть потенциала представим в стандартном виде

$$W_{S}(p,\phi) = f_{0}(p) + \frac{1}{2}a(p)\phi^{2} - \frac{1}{3}c\phi^{3} + \frac{1}{4}b\phi^{4}.$$
 (11)

Здесь

$$a(p) = \alpha \left(1 - \frac{p}{p_c}\right),\tag{12}$$

где *p*<sub>*c*</sub> – критическое давление.

Взаимодействие магнитной и структурной подсистем учтем, полагая поле кубической анизотропии функцией параметра порядка. При этом будем полагать магнитную подсистему подчиненной структурной (императивность), т.е. считать, что условие равновесия вначале выполнено для структурной подсистемы (магнитная на нее не влияет) и есть только обратное действие структурной подсистемы на магнитную.

Таким образом, полагаем

$$H_c(\varphi) = H_{c0}\varphi. \tag{13}$$

Дифференцирование  $W_S$  по  $\phi$  дает

$$W'_{S} = \varphi \left( \alpha \frac{p - p_{c}}{p_{c}} - c\varphi + b\varphi^{2} \right) = 0.$$
(14)

Отсюда находим равновесные значения параметра порядка

$$\phi_0 = 0, \quad \phi_{\pm} = \frac{c}{2b} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4b}{c^2} \alpha \frac{p - p_c}{p_c}} \right).$$
(15)

Для проверки их устойчивости запишем вторую производную:  $f_{\phi}'' = \alpha \frac{p - p_c}{p_c} - 2c\phi + 3b\phi^2$ . Для  $\phi_0$  легко находим  $\left(f_{\phi}''\right)_{\phi=0} = \alpha \frac{p - p_c}{p_c}$ .

Воспользовавшись условием для ненулевых равновесных значений:

$$\alpha \frac{p - p_c}{p_c} - c\varphi_{\pm} + b\varphi_{\pm}^2 = 0, \qquad (16)$$

упростим выражение для второй производной:  $\left(f_{\varphi}''\right)_{\varphi=\varphi_{\pm}} = -2\alpha \frac{p-p_c}{p_c} + c\varphi_{\pm}$ .

Подставляя сюда ф<sub>±</sub>, находим

$$\left(f_{\varphi}''\right)_{\varphi=\varphi_{\pm}} = \frac{c^2}{2b} \sqrt{1 - \frac{4b}{c^2} \alpha \frac{p - p_c}{p_c}} \left(\sqrt{1 - \frac{4b}{c^2} \alpha \frac{p - p_c}{p_c}} \pm 1\right).$$
(17)

Очевидно, что корни уравнения (16) существуют при условии

$$p \le \tilde{p} = p_c \left( 1 + \frac{c^2}{4\alpha b} \right) \ge p_c$$

Таким образом, в этом случае имеется интервал давлений  $[p_c...\tilde{p}]$ , в котором существуют все три корня. При этом на интервале от нуля до  $p_c$  устойчивы корни  $\phi_+$  и  $\phi_-$ , которые соответствуют упорядоченному состоянию с положительным и отрицательным значениями параметра порядка. На интервале  $[p_c...\tilde{p}]$  устойчивы корни  $\phi_{\pm}$  и  $\phi_0$ , которые соответствуют упорядоченному и неупорядоченному состояниям, а корень  $\phi_-$  неустойчив. При давлениях выше  $\tilde{p}$  остается единственный (устойчивый) корень  $\phi_0$ , который соответствует неупорядоченному состоянию. График зависимости равновесных значений параметра порядка от температуры изображен на рис. 6.

Отметим, что отрицательные значения параметра порядка лишены физического смысла. Для того чтобы они не возникали при описании реальной задачи, достаточно рассматривать значения  $p_c$  ниже атмосферного давления, до которого осуществлялась разгрузка в реальном эксперименте. В то же вре-



Рис. 6. Барическая зависимость параметра порядка при  $c \neq 0$  при условии  $4ab/c^2 \ll 1$ . Имеются две ветви и область размытия фазового перехода. Стрелками показаны возможные направления циклического процесса

69

мя вопрос о возможности сохранения аморфного состояния для рассматриваемого материала в вакууме остается открытым, поскольку таких экспериментов не проводилось. Можно отметить, что и в этом случае соответствующим выбором зависимости коэффициента *a* от давления, например в виде

$$a(p) = -\beta - \alpha \frac{p}{p_c} \tag{18}$$

(сравнить с выражением (12)), можно всегда добиться устойчивых отрицательных значений параметра порядка при положительных коэффициентах α и β.

Если система находится в неупорядоченном состоянии при давлениях выше  $\tilde{p}$ , то при декомпрессии она будет оставаться в нем вплоть до давления  $p_c$ . При давлении  $p_c$  неупорядоченное состояние теряет свою устойчивость, и система в зависимости от случайной флуктуации переходит либо в состояние  $\varphi_+$ , либо в состояние  $\varphi_-$  (рис. 6). Как будет протекать обратный процесс при компрессии, зависит от того, в каком начальном состоянии находится система. В случае упорядоченного состояния  $\varphi_+$  при компрессии от нуля система имеет убывающий с изменением температуры параметр порядка, который остается равновесным даже при температуре выше, чем  $p_c$ (переходить в неупорядоченное состояние причин нет, так как эти состояния разделены барьером). Однако в точке  $\tilde{p}$  данный корень, оставаясь конечным, теряет устойчивость, и система скачком переходит в неупорядоченное состояние  $\varphi_0 = 0$ . Таким образом, имеет место гистерезис параметра порядка (рис. 6).

Если изначально система при нулевом давлении находится в упорядоченном состоянии  $\phi_{-}$ , то при компрессии величина параметра порядка так же, как и в предыдущем случае, убывает по абсолютной величине, но до точки  $\tilde{p}$  система не доходит, а параметр порядка обращается в нуль в точке  $p_c$ . Поскольку эта точка является неустойчивой и для данного состояния  $\phi_{-}$ , и для неупорядоченного  $\phi_0$ , при медленной компрессии система спонтанно переходит в состояние  $\phi_{+}$ , а далее эволюционирует по тому же сценарию, что и в предыдущем случае. Если систему при прохождении точки  $p_c$  прессовать быстро, то она может успеть проскочить точку неустойчивости, попасть в область притяжения устойчивого неупорядоченного состояния  $\phi_0$  и оставаться в нем при дальнейшей компрессии (рис. 6).

При декомпрессии давление  $p_c$  является точкой бифуркации. Система в этой точке может попасть и на кривую  $\phi_-$ , и на кривую  $\phi_+$ . Однако при таком давлении фаза  $\phi_+$  уже обладает достаточной устойчивостью, в то время как фаза  $\phi_-$  только начинает формироваться. Поэтому переход в фазу  $\phi_+$  (основное состояние) при медленной декомпрессии будет осуществляться с подавляющей вероятностью.

Будем полагать, что между параметрами модели выполняется условие  $4\alpha b/c^2 \ll 1$ , т.е. давление структурного перехода намного больше  $p_c$ , и практически весь цикл находится под петлей. Обратный переход в кубичес-

кую фазу происходит при давлении  $p_c$ , т.е. при декомпрессии устойчивой является аморфная фаза вплоть до  $p_c$ . Падение давления ниже  $p_c$  сопровождается незначительным увеличением параметра порядка, хотя в этом интервале его можно считать равным единице. Однако в интервале давлений от  $p_c \left(1 + c^2 / 4\alpha b\right)$  вплоть до точки перехода параметр порядка уменьшается ровно в два раза, после чего становится равным нулю. Этим и объясняется сохранение аморфной фазы вплоть до низких значений давления.

Отметим, что явление аморфизации может быть также объяснено в рамках модели  $\phi^6$  [16].

## 4. Структурно-магнитные фазовые переходы в сплавах Гейслера

С учетом магнитного и смешанного, магнитного и структурного вкладов свободная энергия (1) для сплавов Гейслера имеет вид [4]:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}a\left(e_2^2 + e_3^2\right) + \frac{1}{3}be_3\left(e_3^2 - 3e_2^2\right) + \frac{1}{4}c\left(e_2^2 + e_3^2\right)^2 + B_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}e_2\left(m_1^2 - m_2^2\right) + \frac{1}{\sqrt{6}}e_3\left(3m_3^2 - m^2\right)\right) + \frac{1}{2}\alpha\left(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2\right) + \frac{1}{4}\delta\left(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2\right)^2 + K\left(m_1^2m_2^2 + m_2^2m_3^2 + m_3^2m_1^2\right), (19)$$

где *m*<sub>1</sub>, *m*<sub>2</sub>, *m*<sub>3</sub> и *m* – компоненты и модуль вектора намагниченности.

Смешанные члены в (19) представляют собой инварианты кубической симметрии и отвечают за взаимодействие между структурными и магнитными параметрами порядка. Температурная зависимость осуществляется через коэффициенты при вторых степенях структурного (см. формулу (3)) и магнитного параметров порядка:

$$\alpha = \alpha_0 \left( T - T_{\rm C} \right), \tag{20}$$

где  $\alpha_0$  – некоторая новая постоянная,  $T_{\rm C}$  – температура Кюри.

Взаимное влияние структурного и магнитного упорядочения на характер фазовых переходов будем рассматривать при следующих параметрах модели:  $B_2 = 0.02 \text{ J/m}^3$ ,  $\alpha_0 = 1 \text{ J/(m}^3 \cdot \text{K})$ ,  $\delta = 1 \text{ J/m}^3$ ,  $K = -1 \text{ J/m}^3$ . Структурные параметры были приведены выше. Температуру выберем равной 250 K, чтобы при температуре структурного фазового перехода 150 K магнитный порядок был значительным и мог влиять на его протекание.

Кинетические кривые при охлаждении сплава, начиная с температуры 270 К, приведены на рис. 7. В отличие от рис. 5,*a*, здесь знаки обоих структурных параметров противоположны, что соответствует трифуркации системы при фазовом переходе в пользу минимума *3* (см. рис. 1). В остальном поведение кинетических кривых согласуется между собой с учетом большего масштаба температурного интервала на рис. 7, из-за чего тонкая структура флуктуаций не просматривается.



**Рис. 7.** Температурные зависимости структурных (*a*: кривые 1, 2 – соответственно для  $e_2, e_3$ ) и магнитных ( $\delta$ : кривые 1, 2, 3 – соответственно для  $m_1, m_2, m_3$ ) параметров порядка при охлаждении

Кинетические кривые для компонент намагниченности свидетельствуют о том, что при температурах ниже  $T_{\rm C}$  магнитный момент ориентируется вдоль одной из четырех главных диагоналей куба (все три компоненты равны по абсолютной величине, рис. 7, $\delta$ ). Однако в момент прохождения точки структурного фазового перехода ниже температуры  $T_M$  кривые для компонент намагниченности «расщепляются» (рис. 7, $\delta$  и в увеличенном масштабе рис. 8).

В заключение рассмотрим, как изменится протекание спонтанных переходов при фиксированной температуре 155 К, лежащей в области лабильности высоко- и низкосимметричной фаз (рис. 9). Сравнивая рис. 9,a с рис. 4, можно отметить, что посещение в результате спонтанных переходов минимума l потенциала (см. рис. 1) стало значительно реже, что свидетельствует о частичном снятии вырождения в пользу минимумов 2 и 3 за счет влияния наведенного магнитного поля.



**Рис. 8.** Расщепление кривых для компонент намагниченности: кривые 1, 2 -соответственно для  $m_2, m_3$ 

Кроме того, аналогичный вывод данных компьютерного эксперимента на плоскость магнитных моментов показывает, что ориентация магнитного момента имеет характер, аналогичный структурному параметру порядка. На рис. 9,6 просматривается формирование вокруг главной оси куба (точнее, после перехода уже тетраэдра) трех выделенных направлений, которые наиболее часто посещаются в процессе флуктуаций. В данном случае спонтанный структурный переход предопределяет переход между указанными состояниями намагниченности. Отметим, что последние являются зеркальными по отношению к структурным состояниям.



**Рис. 9.** Кинетика спонтанных (флуктуационных) переходов между различными минимумами потенциала в области лабильности при температуре 155 К: a – для структурных параметров порядка на плоскости  $e_2-e_3$ ,  $\delta$  – для компонент намагниченности на плоскости  $m_1-m_2$ 

Таким образом, каждое структурное состояние в низкосимметричной фазе может сопровождаться тремя дополнительными магнитными состояниями, что приводит к большому разнообразию состояний (24 вида) системы в целом, между которыми возможны эффекты переключения.

## 5. Заключение

1. По причине того, что межмартенситные потенциальные барьеры значительно превышают барьеры, разделяющие аустенитный и мартенситные минимумы, переходы между мартенситными состояниями осуществляются не напрямую, а опосредованно через промежуточное аустенитное состояние. Системе более выгодно вначале восстановить кубическую симметрию, а лишь потом перейти в одно из трех мартенситных состояний.

2. Снятие энергетического вырождения за счет влияния спонтанного магнитного поля приводит к большому разнообразию структурно-магнитных состояний (тонкая структура), что открывает дополнительные возможности для управления эффектом памяти формы и кодирования информации в таких сплавах за счет внешних магнитных, механических и тепловых воздействий.

- 1. V.A. Chernenko, E. Cesari, V.V. Kokorin, I.N. Vitenko, Scripta Metall. Mater. 33, 1239 (1995).
- 2. A. Zheludev, S.M. Shapiro, P. Wochner, L.E. Tanner, Phys. Rev. B54, 15045 (1996).
- А.Д. Божко, А.Н. Васильев, В.В. Ховайло, И.Е. Дикштейн, В.В. Коледов, С.М. Селецкий, А.А. Тулайкова, А.А. Черечукин, В.Г. Шавров, В.Д. Бучельников, ЖЭТФ 115, 1740 (1999).

- 4. A.N. Vasil'ev, A.D. Bozhko, V.V. Khovailo, I.E. Dikshtein, V.G. Shavrov, V.D. Buchelnikov, M. Matsumoto, S. Suzuki, T. Takagi, J. Tani, Phys. Rev. B59, 1113 (1999).
- 5. В.Г. Пушин, Н.И. Коуров, А.В. Королев, Е.Б. Марченкова, Н.Н. Куранова, Е.С. Белослудцева, ФТТ **57**, 43 (2015).
- 6. J.A. Monroe, I. Karaman, B. Basaran, W. Ito, R.Y. Umetsu, R. Kainuma, K. Koyama, Y.I. Chumlyakov, Acta Mater. **60**, 6883 (2012).
- Д.С. Кучин, В.В. Коледов, Ю.С. Кошкидько, К. Рогатский, Я. Цвик, Сборник трудов Международной конференции «Фазовые переходы и нелинейные явления в конденсированных средах», 6–9 сентября 2017 г., Махачкала, с. 145–148.
- 8. *А.В. Вашковский, В.С. Стальмахов, Ю.П. Шараевский*, Магнитостатические волны в электронике сверхвысоких частот, Изд-во СГУ, Саратов (1993).
- 9. С.Б. Убизский, Л.П. Павлык, Е. Христофороу, Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия «Физика» **19**, № 1, 68 (2006).
- 10. V.F. Shkar, V.N. Spiridonov, I.G. Salkov, V.V. Morenko, Proc. of the European Conference Physics of Magnetism 2011 (PM'11), Poznan, June 27–July 1, 2011.
- 11. Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников, Фазовые переходы и симметрия кристаллов, Наука, Москва (1984).
- 12. Ю.М. Гуфан, Структурные фазовые переходы, Наука, Москва (1982).
- 13. И.С. Любутин, А.Г. Гаврилюк, УФН 179, 1047 (2009).
- 14. M.A. Fradkin, Phys. Rev. B50, 16326 (1994).
- 15. И.С. Любутин, А.Г. Гаврилюк, И.А. Троян, Р.А. Садыков, Письма в ЖЭТФ **82**, 797 (2005).
- 16. Л.С. Метлов, В.Д. Пойманов, Вестник Челябинского государственного университета № 22(377), вып. 21, 15 (2015).

### L.S. Metlov, V.D. Poimanov

# STRUCTURAL AND MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN MATERIALS OF CUBIC STRUCTURE

Structural and magnetic phase transitions in materials of cubic structure are considered by the example of the Heusler alloys and yttrium iron garnet. It is established that the structural phase transition in Heusler alloys at a fall of temperature and magnetic phase transition in yttrium iron garnet at magnetic field reduction in the saturated state are realised with following the same scenario (trifurcation, polyfurcation). Fluctuational mechanism of the transitions is detected. Effect of magnetization curve splitting at the structural phase transition is revealed. The structural phase transition in yttrium iron garnet is described as the first order phase transition from the cubic symmetry to a higher symmetry of amorphous state.

**Keywords:** structural phase transitions, magnetic phase transition, Curie temperature, temperature of martensite transition, high-symmetry phase, low-symmetry phase, order parameters

Fig. 1. Topology of thermodynamic potential relief at temperature  $T = T_M$ 

**Fig. 2.** Thermodynamic potential: a – along the radius in direction of minimum l (see Fig. 1) at temperature  $T_{eq}$ : 0, l – minima of high-symmetry and low-symmetry phases,

respectively, 2 – the separating maximum;  $\delta$  – along the circle around the centre of plane  $e_2-e_3$  that passes across the minima of low-symmetry phase 1 and across the maximum 2 separating high-symmetry and low-symmetry minima. The angles  $\varphi$ :  $1 - 180^\circ$ ,  $2 - 60^\circ$ ,  $3 - 300^\circ$  suit the minima numbered in Fig. 1

**Fig. 3.** Kinetics of spontaneous (fluctuation) transitions between different minima of the potential within the lability region at the temperature of 155 K: 1, 2, 3 – the states related to the minima of the free energy in Fig. 1; 0 – austenitic state of A-type

Fig. 4. Spontaneous (fluctuation) transitions between different minima of free energy at the temperature of 155 K on plane  $e_2-e_3$ 

Fig. 5. Temperature dependences of structural order parameters at cooling (*a*) and heating ( $\delta$ ): curves *l* and *2* are related to *e*<sub>2</sub> and *e*<sub>3</sub>, respectively

**Fig. 6.** Baric dependence of the order parameter at  $c \neq 0$  and  $4ab / c^2 \ll 1$ . Two branches and a region of phase transition tailing are registered. The arrows show possible directions of a cyclic process

**Fig. 7.** Temperature dependences of structural (*a*: curves 1, 2 are related to  $e_2$ ,  $e_3$ ) and magnetic ( $\delta$ : curves 1, 2, 3 correspond to  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m_3$ , respectively) order parameters at cooling

Fig. 8. Splitting of curves for magnetization components: curves 1, 2 correspond to  $m_2, m_3$ 

**Fig. 9.** Kinetics of spontaneous (fluctuation) transitions between different minima of potential within the lability region at the temperature of 155 K: a – for the structural order parameters on plane  $e_2-e_3$ ,  $\delta$  – for magnetization components on plane  $m_1-m_2$