

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА САМАРИЕВОГО ФЕРРИТА-ГРАНАТА

О. А. Дорофеев, А. И. Попов

Редкоземельные (РЗ) ферриты-гранаты обладают весьма сложными магнитными структурами, которые образованы локализованными магнитными моментами РЗ-ионов и ионов Fe^{3+} в a - и d -подрешетках. В полях $H < 10^6$ Э a - и d -подрешетки можно рассматривать как одну результирующую a - d -подрешетку, намагниченность которой (M_e) равна $M_d - M_a$, где M_d (M_a) — намагниченность d (a)-подрешетки. Магнитная структура РЗ-подсистемы формируется главным образом отрицательным обменным взаимодействием РЗ-ионов с ионами Fe^{3+} в d -подрешетке, которое мы будем рассматривать в изотропном приближении, и влиянием кристаллического поля на электронную структуру РЗ-ионов. Обменным взаимодействием между РЗ-ионами мы будем пренебрегать, так как его величина существенно меньше величины обменного R—Fe взаимодействия. РЗ-ионы в структуре граната располагаются по шести неэквивалентным узлам, симметрия окружения которых описывается точечной группой D_2 (222). Ориентации локальных осей симметрии всех неэквивалентных узлов соответствуют принятой в работе [1]. Следовательно, в общем случае РЗ-ионы в ферритах-гранатах образуют шесть магнитных подрешеток.

Большой интерес представляет собой исследование магнитной структуры $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. Это обстоятельство обусловлено двумя основными причинами: изинговским характером расщепления основного дублета иона Sm^{3+} в магнитном поле и конкуренцией основной M_0 и так называемой ванфлековской $M_{\text{вф}}$ составляющих магнитного момента иона Sm^{3+} (см., например, [12]). Для выявления особенностей магнитной структуры $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ необходимо знать энергетический спектр и волновые функции иона Sm^{3+} . Гамильтониан иона Sm^{3+} представим в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_0} + \mathcal{H}_{\text{ор}} + \mathcal{H}_z, \quad (1)$$

где \mathcal{H}_{s_0} — гамильтониан спин-орбитального взаимодействия; $\mathcal{H}_z = \mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\mathbf{H} + 2\mu_B\mathbf{S}\mathbf{H}_{\text{ex}}$ — гамильтониан взаимодействия иона Sm^{3+} с внешним \mathbf{H} и обменным \mathbf{H}_{ex} полями; зависимость H_{ex} от температуры T с достаточной степенью точности описывается выражением $H_{\text{ex}}(T) = H_{\text{ex}}(0)M_d(T)/M_d(0)$, $H_{\text{ex}}(0) = 431$ кЭ [3]; \mathcal{H}_{cr} — гамильтониан кристаллического поля, который удобно представить в виде [4]

$$\mathcal{H}_{\text{ор}} = \sum_{kq} B_k^q (C_k^k + C_{-q}^k), \quad (2)$$

где C_{kq}^k — неприводимые тензорные операторы; B_k^q — параметры кристаллического поля, определенные в [3] из сопоставления рассчитанных значений температур фазовых переходов $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ с опытными данными.

Рассмотрим наиболее интересный случай $M_{\text{вф}} \parallel [111]$, реализующийся при $H=0$ для $T > 66$ К [2, 3]. Для ионов Sm^{3+} в i -м неэквивалентном месте собственные функции основного мультиплетта ${}^{2S+1}L_J$ ($L=5$, $S=5/2$, $J=5/2$), расщепленного кристаллическим, обменным и внешним полями, можно представить в системе координат с осью $z \parallel [111]$ в виде

$$|\psi_n^i\rangle = \sum_m C_{nm}^i |LSJm\rangle, \quad (3)$$

а собственные значения энергии

$$E_n^i = \langle \psi_n^i | \mathcal{H}_{\text{ор}} - \mu_B g_J H_{\text{eff}}^0 J_z | \psi_n^i \rangle, \quad (4)$$

где $H_{\text{eff}}^0 = H - [2(g_J - 1)/g_J]H_{\text{ex}}$; $g_J^0 = 2/7$ — фактор Ланде. Учтем теперь смешивание в поле волновых функций основного и первого возбужденного (${}^{2S+1}L_{J+1}$) мультиплетов. В этом случае собственные функции примут вид [5]

$$|\psi_i\rangle = \sum_m C_{im}^i \{ |LSJm\rangle + \Delta^{-1} \mu_B H_{\text{eff}}^i s_m |LSJ+im\rangle \}, \quad (5)$$

где $\Delta \approx 1000 \text{ см}^{-1}$ — энергетический интервал между основным и первым возбужденным мультиплетом, $H_{\text{eff}}^i = H - 2H_{\text{ex}}$,

$$s_m = (1/2) \{ [1 - m^2/(J+1)^2] (L+S+J+2)(L+S-J)(2I+3)^{-1} \}^{1/2}. \quad (6)$$

Магнитную структуру и намагниченность самариевой подсистемы можно определить, усреднив оператор компонент магнитного момента $\mu_\alpha = \mu_B (L_\alpha + 2S_\alpha)$, $\alpha = x, y, z$ по состояниям (5).

В данной работе волновые функции (5) и уровни энергии (4) были определены путем решения секулярного уравнения $\det \| \mathcal{H}_i - \lambda_i E \| = 0$, где \mathcal{H}_i — гамильтониан иона Sm^{3+} в i -позиции (см. (1)). Затем при учете смешивания мультиплетов была рассчитана температурная зависимость намагниченности самариевой подсистемы M_{Sm} и найдена конфигурация магнитных моментов ионов Sm^{3+} . На рис. 1 теоретическая зависимость $|M_{\text{Sm}}(T)|$ (в расчете на один РЗ-ион) сопоставлена с эксперименталь-

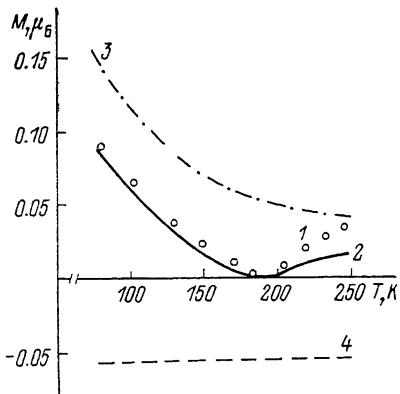


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности ионов самария в $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

1 — эксперимент, 2 — теория, 3 — $M_i(T)$, 4 — $M_r(T)$.

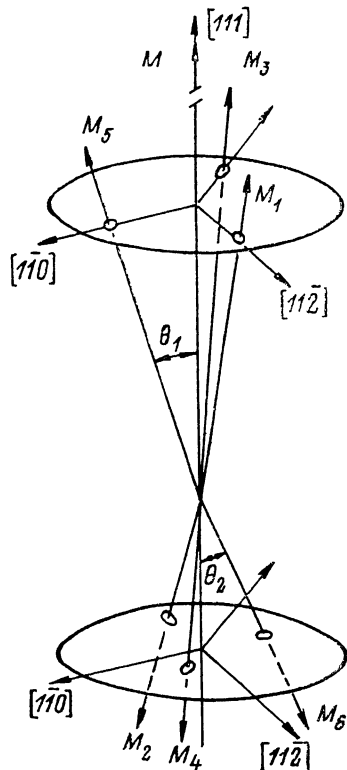


Рис. 2. Структура магнитных моментов РЗ-ионов в $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

ной [5]. Видно, что установленные в [3] значения параметров B_k^q позволяют правильно описать зависимость $|M_{\text{Sm}}(T)|$. Изменение M_{Sm} знака при $T = T_0 \approx 200 \text{ К}$ обусловлено следующим обстоятельством. Намагниченность РЗ-подсистемы имеет вид [6]

$$M_{\text{Sm}} = M_0(H_{\text{eff}}^0, T) + M_{vv},$$

$$M_0 = \frac{1}{6} \mu_B g_J \sum_{m i r} |C_{im}^i|^2 m \rho_i^r, \quad M_{vv} = (3\Delta)^{-1} \mu_B^2 H_{\text{eff}}^1 g_J \sum_{m i r} |C_{im}^i|^2 s_m^2 \rho_i^r,$$

$$\rho_i^r = \exp(-E_i^r/T) / \sum_k \exp(-E_k^r/T),$$

где M_0 — намагниченность РЗ-ионов при отсутствии смешивания мультиплетов; M_{vv} — вклад в M_{Sm} ванфлековских составляющих магнитных моментов, связанных с примешиванием первого возбужденного (термически незаселенного) мультиплета к основному. Знак M_0 совпадает со знаком H_{eff}^0 ; следовательно, в нашем случае ($H_{\text{eff}}^0 = H + 5H_{\text{ex}}$) $M_0 > 0$. В сла-

Был поля $H_{\text{eff}}^1 = H - 2H_{\text{ex}} < 0$, поэтому и $M_{rr} < 0$. При низких температурах $M_0 > |M_{rr}|$. С ростом температуры по мере заселения уровней основного мультиплета $M_0 (H_{\text{eff}}^1, T) \rightarrow 0$, в то время как M_{rr} при этом меняется слабо. Поэтому существует такое значение $T = T_0$, при котором $M_0(T_0) = |M_{rr}|$, а следовательно, и $M_{\text{Sm}}(T_0) = 0$.

Магнитная структура $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ при 100 К приведена на рис. 2 ($M_1 = 0.11 \mu_B$, $M_2 = -0.058 \mu_B$, $\theta_1 \approx 22^\circ$, $\theta_2 \approx 37^\circ$ для $T = 100 \text{ К}$). Обращает на себя внимание совершенно необычный вид конфигурации магнитных моментов ионов Sm^{3+} . Имеются две ярко выраженные магнитные подсистемы. Первая подсистема образована магнитными моментами ионов в местах 1, 3, 5, а вторая — в местах 2, 4, 6. Внутри каждой подсистемы моменты равны друг другу по величине и лежат в плоскостях $(1\bar{1}0)$, $(01\bar{1})$ и $(10\bar{1})$ под одинаковыми углами к оси $[111]$, причем в случае первой подсистемы этот угол острый, а в случае второй — тупой. Вклады M_1 и M_2 этих подсистем в M_{Sm} противоположны по знаку (рис. 2). Магнитные моменты ионов Sm^{3+} в местах 1, 3, 5 ориентированы под острым углом к M_{Fe} , в то время как магнитные моменты ионов Sm^{3+} в местах 2, 4, 6 составляют с M_{Fe} тупой угол. Таким образом, при отсутствии $\text{Sm}-\text{Sm}$ обменного взаимодействия указанные магнитные подсистемы ионов Sm^{3+} «псевдоантиферромагнитно» упорядочены. Этот факт обусловлен тем, что для ионов Sm^{3+} , расположенных в местах 1, 3, 5, основной вклад в величину магнитного момента дает изинговская составляющая, обусловленная расщеплением основного дублета обменным полем. Эти составляющие направлены вдоль осей $\langle 110 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 101 \rangle$ соответственно для позиций 1, 3, 5, т. е. образуют острый угол с направлением M_{Fe} . В то же время в случае $M_{\text{Fe}} \parallel \langle 111 \rangle$ для ионов в позициях 2, 4, 6 изинговские составляющие магнитного момента обращаются в нуль, так как M_{Fe} перпендикулярен изинговским осям намагничивания этих ионов. Основной вклад в магнитный момент этих ионов дают ванфлековские составляющие, обусловленные примешиванием первого возбужденного мультиплета к основному и образующие тупой угол с направлением M_{Fe} .

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Nekvasil V. // Czech. J. Phys. 1984. V. B34. P. 1052—1059.
- [2] Звездин А. К., Матвеев В. М., Мухин А. А., Попов А. И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М., 1985. 296 с.
- [3] Дорофеев О. А., Попов А. И. // ФТТ. 1989. Т. 31. N 11. С. 124—126.
- [4] Wybourne B. G. Spectroscopic properties of rare earths. N. Y., 1965. 236 p.
- [5] Gulliot M., Le Gall H., Marhand A. // IEEE Trans. Magn. 1986. V. 22. N 5. P. 1239—1241.
- [6] Валиев У. В., Звездин А. К., Криччик Г. С. и др. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. N 7. С. 311—326.

Московский институт электронной техники

Поступило в Редакцию
9 апреля 1990 г.

УДК 537.226

© Физика твердого тела, том 32, № 11, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 11, 1990

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ИЗОСТРУКТУРНОЙ СИСТЕМЕ СЕЛЕНАТА КАЛИЯ

Л. Н. Пелих, А. П. Шамшин, Э. В. Матюшкин

Селенат калия относится к обширному классу кристаллов структурного типа $\beta\text{-K}_2\text{SeO}_4$, $D_{2h}^{16} - Pnam$, $z=4$ с общей формулой $A_2\text{BX}_4$ ($A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{NH}_4$, $\text{BX}_4 = \text{SO}_4, \text{SeO}_4, \text{BeF}_4$).

Известно, что K_2SeO_4 испытывает ряд фазовых переходов (ФП)

