

3. Подзоны занятых состояний O ($2p$) и Cu ($3d$) типа налагаются друг на друга, их максимумы лежат соответственно ~ 2.5 и ~ 1 эВ ниже уровня Ферми, т. е. в основной своей массе $3d$ -подзона находится ближе к уровню Ферми, чем $2p$ -подзона. Этот вывод не согласуется с теоретическим анализом распределения парциальных плотностей работ [1, 2], но нельзя не отметить, что в последнее время появились расчеты, которые дают максимум парциальной $3d$ -плотности довольно близко к уровню Ферми [16, 17]. К тому же следует иметь в виду, что при зонной интерпретации не учитывается локальная перестройка валентных состояний вследствие появления остовой дырки. Эффекты релаксации особенно сильно могут повлиять на распределение Cu ($3d$)-подобных состояний $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

В заключение выражаем глубокую благодарность М. А. Эланго за предложение темы и участие в обсуждении результатов, И. Мерилоо за изготовленные образцы, А. М.-Э. Саару за помощь и содействие в проведении измерений и Ч. Б. Луцику за постоянный интерес к работе.

Л и т е р а т у р а

- [1] Mattheiss L. F., Hamann O. R. // Sol. St. Commun. 1987. V. 63. N 5. P. 395—400.
- [2] Анисимов В. И., Галахов В. П., Курмаев Э. Э. и др. // ФММ. 1988. Т. 65. № 1. С. 207—208.
- [3] Onellion M., Chang Y., Niles D. W. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 1. P. 819—821.
- [4] Steffel N. G., Tarascon I. M., Chang Y. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 7. P. 3986—3989.
- [5] Sarma D. D., Sreedhar K., Ganguly P., Rao C. N. R. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 4. P. 2371—2373.
- [6] Steiner P., Kinsinger V., Sander T. et al. // Z. Phys. B. 1987. V. 67. N 1. P. 19—23.
- [7] Немощкаленко В. В., Уваров В. Н., Ерещенко А. А. и др. // Металлофизика. 1988. Т. 10. № 1. С. 116—119.
- [8] Kohiki S., Hamada T., Wada T. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 4. P. 2290—2294.
- [9] Jarmoff J. A., Clarke D. R., Drube W. et al. // Phys. Rev. B, 1987. V. 36. N 7. P. 3967—3970.
- [10] Bianconi A., Congiu Castellano A., De Santis M. et al. // Sol. St. Commun. 1987. V. 63. N 11. P. 1009—1013.
- [11] Wagener T. I., Gao Y., Weaver I. H. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 7. P. 3899—3902.
- [12] Луцик Ч. Б., Куусманн И. Л., Фельдбах Э. Х. и др. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 12. С. 3667—3672.
- [13] Tsang K.-L., Zhang C. H., Callcott T. A. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 4. P. 2293—2296.
- [14] Nakai S., Mitsuishi T., Sugawara H. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 17. P. 9241—9246.
- [15] Майсте А. А., Л'ус Р. Э., Кучас С. А. и др. // ЖЭТФ, 1980. Т. 76. № 3. С. 941—951.
- [16] Temmerman W. M., Stocks G. M., Durham P. I., Sterne P. A. // J. Phys. 1987. V. 17. N 5. P. L135—141.
- [17] Bullett D. W., Dauson W. G. // J. Phys. C. 1987. V. 20. N 11, P. L853—L856.

Институт физики АН ЭССР
Тарту

Поступило в Редакцию
27 июля 1988 г.

УДК 546.72.78.682'22 : 541.67

Физика твердого тела, том 31, в. 1, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 1, 1989

ПЕРЕХОД АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ—ФЕРРИМАГНЕТИЗМ В СИСТЕМЕ $1/2[\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Cr}_2\text{S}_4]$

Р. З. Садызов, А. Д. Намазов

Соединения ZnCr_2S_4 и CoCr_2S_4 кристаллизуются в структуре шпинели и являются соответственно антиферро- и ферримагнетиком [1, 2]. С целью установления влияния замещения ионов Zn ионами Co в тетраэдрических

узлах на магнитные свойства и характер изменения внутри- и междодреточного обменного взаимодействия нами проведено исследование намагниченности системы твердых растворов $Zn_{1-x}Co_xCr_2S_4$.

Образцы для исследования получены в кварцевых ампулах взаимодействием исходных компонентов высокой чистоты. Синтез производился в следующей последовательности. В течение 15 сут температура ампул повышалась от комнатной до ~ 1100 К. Эта температура поддерживалась в течение 7 сут, затем медленно понижалась до комнатной. Полученные в порошкообразном виде образцы тщательно измельчались, спрессовывались под давлением 1.0 ГПа и с целью гомогенизации отжигались в вакууме в течение 10 сут. Рентгеноструктурный анализ позволил установить, что все полученные составы однофазны и кристаллизуются в структуре шпинели с параметром решетки $a=0.9982$ ($x=0.1$), 0.9976 (0.2), 0.9965 (0.4), 0.9953 (0.6) и 0.9942 нм (0.8), что соответствует закону Вергарда.

Намагниченность измерена на маятниковом магнитометре Доменикалли. Спонтанная намагниченность при фиксированной температуре

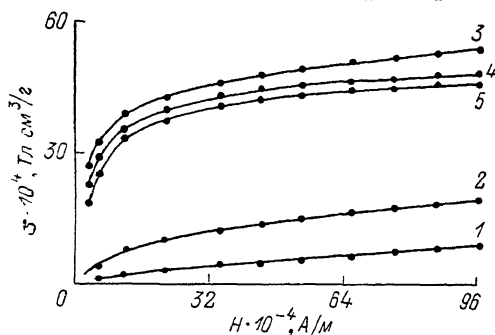


Рис. 1.

определена экстраполяцией намагниченности, измеренной при различных магнитных полях ($53.6 \cdot 10^4$, $76 \cdot 10^4$, $86 \cdot 10^4$ А/м), на нулевое магнитное поле.

На рис. 1 приведена зависимость удельной намагниченности составов $Zn_{1-x}Co_xCr_2S_4$ (x : 1 — 0.1, 2 — 0.2, 3 — 0.4, 4 — 0.6, 5 — 0.8) от магнитного поля при 4.2 К. Как видно из рисунка, изотермы намагниченности для составов с $x \geq 0.2$ характерны для материалов, обладающих спонтанной намагниченностью. Процесс технического намагничивания этих составов заканчивается в полях до $12 \cdot 10^4$ А/м, после чего наблюдается некоторый парапроцесс.

Зависимость $\sigma(H)$ для $x=0.1$ линейна (рис. 1) и характерна для антиферромагнитных материалов. О наличии антиферромагнетизма в этом составе свидетельствует также температурная зависимость магнитной восприимчивости (рис. 2, вставка). Как видно из рис. 2, с повышением температуры, начиная от 4.2 К, восприимчивость растет до некоторого максимального значения, затем линейно уменьшается. Температура, при которой восприимчивость в зависимости $\chi(T)$ достигает максимального значения, соответствует температуре Нееля образца с $x=0.1$ и равна 10 К. На рис. 2 приведены также температурные зависимости спонтанной намагниченности составов с $x=0.2$ (1), 0.4 (2), 0.6 (3), 0.8 (4).

Рассчитаны магнитные моменты насыщения n составов при 4.2 К, которые оказались равными 1.41 μ_B ($x=0.2$), 3.14 (0.4), 2.79 (0.6) и 2.61 (0.8). Концентрационная зависимость магнитного момента, а также точки Кюри, определенной методом термодинамических коэффициентов [3], приведена на рис. 3. Видно, что с увеличением x точка Кюри увеличивается, приближаясь к известным в литературе значениям T_K для $CoCr_2S_4$ [2], что свидетельствует об усилении обменного взаимодействия между тетраэдрическими подрешетками. Зависимость $n(x)$, однако, имеет мак-

симум при $x=0.4$, после чего уменьшается. Механизм изменения магнитного момента в системе $Zn_{1-x}Co_xCr_2S_4$ может быть следующим.

При замещении ионов Zn ионами Co последние занимают только тетраэдрические междоузлия. В области $0 \leq x < 0.2$ доминирующую роль про-

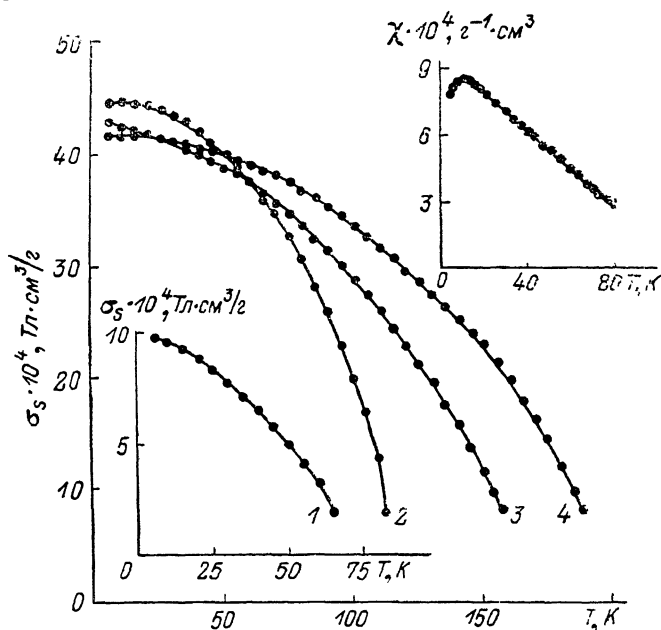


Рис. 2.

должает играть антиферромагнитное взаимодействие ионов хрома в октаэдрической подрешетке, в результате чего отсутствует спонтанная намагниченность образца. С дальнейшим повышением содержания Co, начиная от $x=0.2$, в тетраэдрической подрешетке возникает локализованный магнитный момент, под воздействием которого происходит некоторая переориентация спиновых магнитных моментов хрома в октаэдрической подрешетке, что в свою очередь приводит к результирующему спонтанному моменту образца. При $x=0.4$, по-видимому, происходит переориентация значительной части спиновых магнитных моментов хрома, т. е. доминирующую роль начинает играть ферромагнитное взаимодействие. Поэтому дальнейшее повышение содержания Co в тетраэдрических узлах и, следовательно, увеличение магнитного момента тетраэдрической подрешетки, приводят к уменьшению результирующего магнитного момента образца.

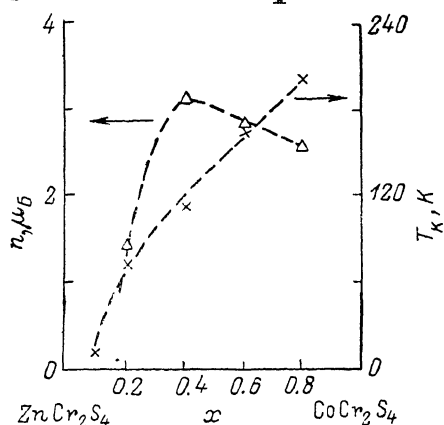


Рис. 3.

Следует отметить, что рассчитанные по неелевской модели ферромагнетизма значения магнитного момента (например, для состава $Zn_{0.6}Co_{0.4}Cr_2S_4$, $n=4.8 \mu_B$) для всех составов $Zn_{1-x}Co_xCr_2S_4$ несколько превышают экспериментальные. Это может быть связано с существованием доли антиферромагнитного упорядочения ионов хрома в октаэдрической подрешетке и при $x \geq 0.4$. Не исключена также возможность, что некоторое несоответствие экспериментальных и расчетных значений магнитного момента связано с увеличением g -фактора ионов Co^{2+} в тетраэдрических узлах за счет спин-орбитального взаимодействия по сравнению с чисто спиновым зна-

чением ($g=2$). На такую возможность указано в [4], где с учетом спин-орбитального взаимодействия, а также ковалентности для ионов Co^{2+} в тетраэдрическом окружении получено значение до $g=2.4$.

Таким образом, замещение ионов Zn в тетраэдрической подрешетке соединения ZnCr_2S_4 ионами Co приводит к изменению типа обменного взаимодействия в октаэдрической подрешетке и концентрационному фазовому переходу антиферромагнетизм—ферримагнетизм.. }

Л и т е р а т у р а

- [1] Метфессель Э., Маттис Д. Магнитны. полупроводники. М., 1972. С. 405.
- [2] Gibart P., Dormann J.-L., Pellerin Y. // Phys. St. Sol. 1969. V. 36. N 1. P. 187—194.
- [3] Белов К. П., Горяга А. Н. // ФММ. 1956. Т. 2. № 3. С. 441—446.
- [4] Ham F. S., Ludwig G. W., Watkins G. D., Woodbury H. H. // Phys. Rev. Lett. 1960. V. 5. N. 10. P. 468—470.

Институт физики АН АзССР
Баку

Поступило в Редакцию
5 января 1988 г.
В окончательной редакции
1 августа 1988 г.