

ражений не возникает необходимости обрезания $\mathcal{I}(\omega)$, так как в $\mathcal{I}(\omega)$ не содержатся выражения, стремящиеся к бесконечности ни при каких ω .

Из изложенного видно, что использование существующей статистической теории 2-го порядка [4] может привести к значительным погрешностям при определении параметров дефектов из экспериментальных форм и ширин линий. Вывод формул, аналогичных полученным выше для других дефектов, не представляет принципиальных трудностей. Так, нами были получены подобные формулы и для точечных заряженных дефектов. В силу более сложного закона распределения их электрического поля формулы оказались более громоздкими, чем в случае дипольных дефектов, но их применение не встретило трудностей.

Список литературы

- [1] Klein M. W., Held C., Zuroff A. J. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 3576—3589.
- [2] Ройдин А. Б., Кравцова И. Н. / Тр. Междунар. школы по магнитному резонансу. Новосибирск, 1987. С. 164.
- [3] Вугмайстер Б. Е., Быков И. П., Кондакова И. В., Лагута В. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 5. С. 2449—2454.
- [4] Stoneham A. M. // Rev. Mod. Phys. 1969. V. 41. N 1. P. 82—108.

Институт полупроводников АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
12 июня 1989 г.

УДК 538.222 : 546.654

Физика твердого тела, том 32, в. 1, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 1, 1990

МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ R_xNi_{1-x} ($R=La, Nd$) ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А. Э. Вафин, В. В. Сингер, И. З. Радовский,
П. В. Гельд, А. Н. Цмокалюк

Исследование электронного и магнитного строения соединений 4f—3d-элементов — одна из важных задач физики твердого тела. Особый интерес представляют интерметаллиды R_xNi_{1-x} , отличающиеся слабыми обменными взаимодействиями между атомами подрешеток, что облегчает разделение вкладов компонентов в их магнитную восприимчивость. Однако сведения о магнитной восприимчивости этих соединений при высоких температурах отсутствуют.

В настоящей работе были изучены температурные зависимости магнитной восприимчивости (χ) интерметаллидов RNi_5 , R_2Ni_7 , RNi_3 , RNi_2 , RNi и R_3Ni ($R=La, Nd$) в интервале температур от 300 до температур, на 50 К превышающих температуры их плавления. Исследованные соединения готовились сплавлением навесок чистых компонентов в вакуумной дуговой печи на водоохлаждаемом медном поду. Полученные слитки отжигались в вакууме в течение 50—70 ч при температурах на 50—100° ниже температур их плавления и медленно охлаждались с печью. Однофазность приготовленных образцов контролировалась рентгенографическим и металлографическим методами.

Исследования температурных зависимостей χ проводились методом Фарадея в атмосфере очищенного гелия (с применением контейнеров из Y_2O_3). При этом использовались автоматизированные маятниковые весы с непрерывной регистрацией сигнала [1].

В изученных условиях температурные зависимости магнитной восприимчивости соединений Nd_xNi_{1-x} (рис. 1) и La_xNi_{1-x} , за исключением интерметаллидов $LaNi$ и La_3Ni , которые являются паулиевскими парамагнети-

ками, на что указывает небольшое положительное значение $\partial\chi/\partial T$ (рис. 2), хорошо описываются модифицированным законом Кюри—Вейсса

$$\gamma(T) = \gamma_0 + \frac{N_A \mu^2}{3k(T - \Theta)}, \quad (1)$$

где μ — средний магнитный момент на атом соединения, χ_0 — температурно независимое слагаемое, в основном обусловленное паулиевской восприимчивостью коллективизированных электронов, Θ — парамагнитная температура Кюри.

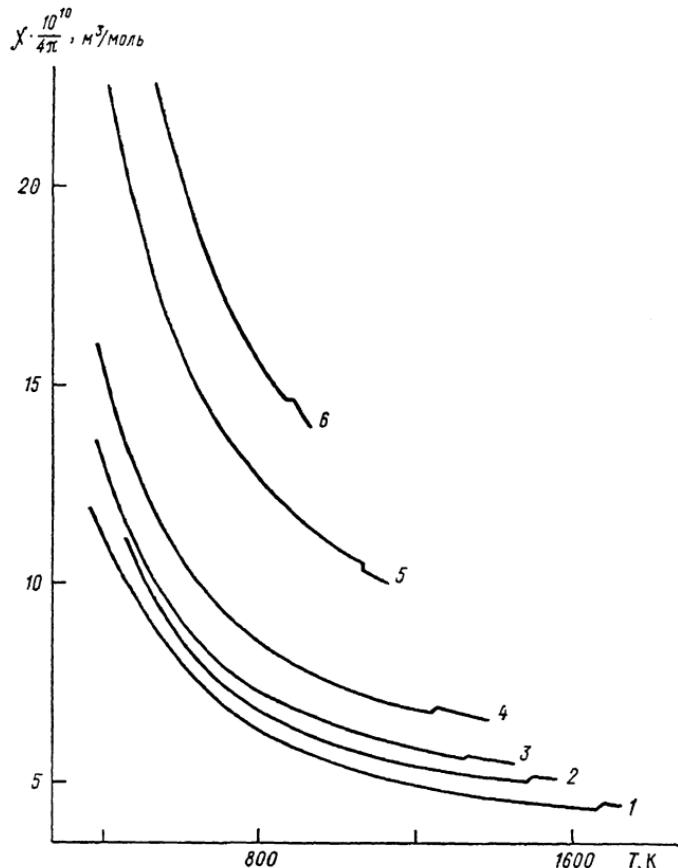


Рис. 1. Политермы магнитной восприимчивости соединений Nd_xNi_{1-x} .
1 — $NdNi_5$, 2 — Nd_2Ni_7 , 3 — $NdNi_3$, 4 — $NdNi_2$, 5 — $NdNi$, 6 — $Nd_3Ni (+3)$.

Установленные по аномалиям на политермах $\chi(T)$ температуры плавления изученных соединений хорошо согласуются с указанными на диаграммах состояний систем $Nd-Ni$ [2] и $La-Ni$ [3].

С учетом того, что соединения Nd_xNi_{1-x} отличаются от изоструктурных интерметаллидов La_xNi_{1-x} наличием в них редкоземельных атомов с частично заполненной $4f$ -оболочкой (тогда как у атомов лантана $4f$ -оболочка пуста), их вклад в магнитную восприимчивость рассчитывался по формуле

$$\chi^{4f}(T) = \chi_1(T) - \chi_2(T),$$

где $\chi_1(T)$ и $\chi_2(T)$ — значения магнитной восприимчивости соединений Nd_xNi_{1-x} и La_xNi_{1-x} соответственно. Для установления магнитных моментов атомов неодима полученные при этом данные аппроксимировались законом Кюри—Вейсса

$$\chi^{4f}(T) = x \left[\frac{N_A (\mu'_{Nd})^2}{3k(T - \Theta')} + \Delta \chi(T) \right], \quad (2)$$

где μ'_{Nd} — магнитный момент атома неодима в основном состоянии; $\Delta\chi(T)$ — вклад ванфлековского парамагнетизма в восприимчивость атомов неодима. С учетом того, что магнитный момент атомов лантана равен нулю, и, согласно [4], характер атомного окружения ионов РЗМ слабо влияет на их мультиплетную структуру, значения $\Delta\chi(T)$ считались одинаковыми как для металлического неодима, так и для его соединений с никелем и рассчитывались по формуле:

$$\Delta\chi(T) = \chi^{\text{Nd}}(T) - \chi^{\text{La}}(T) - \frac{N_A g^2 J(J+1) \mu_B^2}{3kT}, \quad (3)$$

где $\chi^{\text{Nd}}(T)$, $\chi^{\text{La}}(T)$ — значения магнитной восприимчивости чистых неодима и лантана, заимствованные из работы [5], $g[J(J+1)]_{\mu_B}^{1/2} = 3.62 \mu_B$ — теоретическое значение магнитного момента свободного трехвалентного иона неодима в основном состоянии.

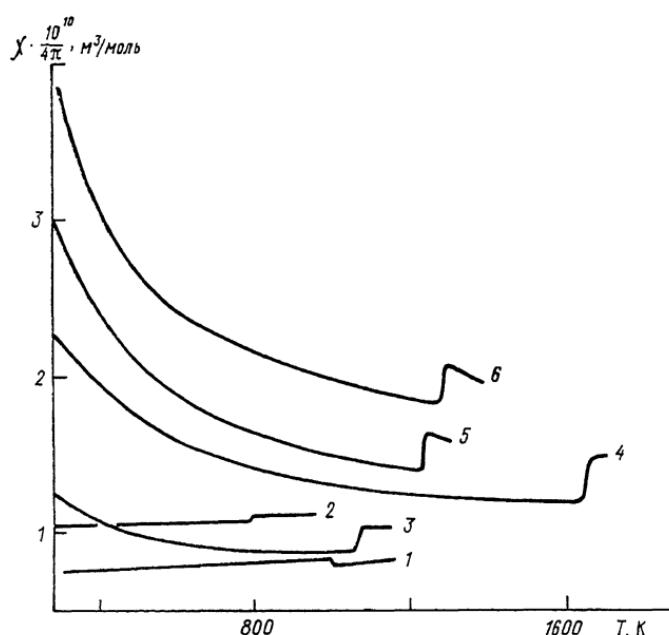


Рис. 2. Политермы магнитной восприимчивости соединений $\text{La}_x\text{Ni}_{1-x}$.

Для получения истинного значения восприимчивости число в скобках следует прибавить к величине, отсчитанной по оси ординат. 1 — LaNi , 2 — La_2Ni_3 , 3 — LaNi_2 , 4 — $\text{LaNi}_5 (+0.5)$, 5 — LaNi_5 , 6 — $\text{La}_2\text{Ni}_7 (-0.25)$.

В таблице обобщены рассчитанные по формуле (1) с использованием метода наименьших квадратов значения средних магнитных моментов на атом интерметаллидов $\text{La}_x\text{Ni}_{1-x}$ и $\text{Nd}_x\text{Ni}_{1-x}$ (μ), а также установленные с помощью соотношения (2) магнитные моменты ионов неодима в соединениях $\text{Nd}_x\text{Ni}_{1-x}$ в основном состоянии (μ'_{Nd}) и при условии $\Delta\chi(T)=0$ усредненные по температуре (от 300 К до точек плавления) их значения (μ_{Nd}). Кроме того, в ней приведены магнитные моменты ионов никеля (μ_{Ni}), рассчитанные с помощью выражения $\mu = x\mu_R + (1-x)\mu_{\text{Ni}}$. Значения всех магнитных моментов оценены с точностью $\pm 0.05\mu_B$.

Как видно из приведенных в таблице данных, магнитный момент атомов неодима в основном состоянии слабо зависит от состава интерметаллида и хорошо согласуется с теоретическим его значением, соответствующим свободному трехвалентному иону в основном состоянии. Это обстоятельство можно рассматривать как дополнительное подтверждение вывода [4] о слабом влиянии характера атомного окружения на мультиплетную структуру ионов РЗМ в их соединениях с 3d-металлами. Кроме того,

Значения χ_0 , средних магнитных моментов на атом μ соединений R_xNi_{1-x}
и магнитных моментов атомов их компонентов ($\mu_{La} = 0$)

La_xNi_{1-x}			Nd_xNi_{1-x}					
$\chi_0 \cdot 10^{10}/4\pi$, $m^3/\text{моль}$	μ, μ_B	μ_{Ni}, μ_B	$\chi_0 \cdot 10^{10}/4\pi$, $m^3/\text{моль}$	μ, μ_B	μ'_{Nd}, μ_B	μ_{Nd}, μ_B	μ_{Ni}, μ_B	
RNi_6	1.57	0.38	0.46	3.15	1.18	3.57	4.98	0.42
R_2Ni_7	1.46	0.40	0.51	3.20	1.36	3.51	4.60	0.43
RNi_3	1.28	0.37	0.49	3.40	1.44	3.64	4.61	0.39
RNi_2	0.89	0.07	0.10	4.20	1.50	3.62	4.50	0
RNi	0.80	0	0	4.55	2.10	3.63	4.20	0
R_3Ni	1.05	0	0	4.40	2.96	3.70	3.94	0

значения μ_{Nd} существенно меньше μ_{Nd} благодаря заметному вкладу в последний возбужденных уровней мультиплета (с повышенным значением J).

Выяснилось, что магнитный момент ионов никеля μ_{Ni} в соединениях La_xNi_{1-x} и Nd_xNi_{1-x} относительно невелик ($< 0.5 \mu_B$), максимальен при $x=2/9$ и равен нулю при $x \geq 1/3$ для Nd_xNi_{1-x} , при $x > 1/3$ для La_xNi_{1-x} . Это свидетельствует о том, что с ростом концентрации РЗМ в интерметаллидах RNi_2 завершается заполнение 3d-зоны никеля валентными электронами лантаноида.

Влияние состава изученных соединений на температурно независимое слагаемое χ_0 , рассчитанное по формуле (I) (для $LaNi$ и La_3Ni $\chi_0 \equiv \chi$), достаточно сложное. В частности, при увеличении содержания лантана в интерметаллидах La_xNi_{1-x} , богатых никелем, имеет место резкое уменьшение χ_0 , свидетельствующее о происходящем по мере заполнения 3d-зоны никеля валентными электронами лантана понижении плотности состояний на уровне Ферми. Последующий же рост χ_0 при $x > 0.5$ связан, видимо, с увеличением вклада в плотность состояний на уровне Ферми валентных (5d, 6s) электронов лантана, которые остаются неизрасходованными на заполнение 3d-зоны никеля. В случае же Nd_xNi_{1-x} с повышением концентрации в них неодима наблюдается увеличение χ_0 , в основном обусловленное возрастающим обменным усилением паулиевской восприимчивости электронов проводимости в результате их взаимодействия с большими локализованными моментами ионов неодима.

Авторы признательны Ф. Химматкулову за участие в аттестации образцов.

Список литературы

- [1] Коновалов С. В., Сингер В. В., Радовский И. З., Клепикин В. А. // ПТЭ. 1987. № 3. С. 162–165.
- [2] Диаграммы состояний металлических систем // Деп. в ВИНИТИ АН СССР. М., 1986. В. 30. Ч. 1. С. 204.
- [3] Иванченко В. Г., Кобзенко Г. Ф., Свечников В. Н. // ДАН УССР, сер. А. 1982. № 1. С. 83.
- [4] Коновалов С. В. // Автореф. канд. дис. Свердловск, 1987.
- [5] Коновалов С. В., Сингер В. В., Радовский И. З., Гельд П. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 1768–1773.

Уральский политехнический институт им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
13 июня 1989 г.