

УДК 537.622

ЛОКАЛЬНАЯ АНИЗОТРОПИЯ И ЭФФЕКТ ВОЗНИКНОВЕНИЯ НЕСКОЛЬКИХ СВЕРХТОНКИХ ПОЛЕЙ НА ЯДРАХ ПРИМЕСИ В РЗ МЕТАЛЛАХ

Ю. П. Иркин, Е. В. Розенфельд

Дано качественное объяснение эффекта возникновения нескольких сверхтонких полей на ядрах примеси в редкоземельных (РЗ) металлах за счет высокой локальной магнитной анизотропии ближайшего окружения примеси. Показано, что резкое различие γ -резонансных спектров олова в тербии (одно сверхтонкое поле) и диспрозии (два сверхтонких поля) может быть связано с различием их осей легкого намагничивания в базисной плоскости.

В исследованиях γ -резонанса на диамагнитных примесях в редкоземельных металлах (РЗМ) [1-4] было обнаружено интересное и несколько неожиданное явление. В некоторых случаях наблюдалось значительное уширение спектра, что было интерпретировано авторами как существование нескольких значений сверхтонкого поля на ядрах примеси. В частности, именно так обстояло дело с примесью Sn (0.5 ат.%) в Dy [1]. В то же время уширение спектра Sn в Tb не наблюдалось [2].

Поскольку хорошо известно, что ионы Sn в РЗМ могут являться лишь примесью замещения, а все узлы ГПУ решетки эквивалентны, объяснить такую ситуацию можно было бы неэквивалентностью узлов в магнитном отношении. Однако уширение спектра наблюдается в области низких температур, где и Tb и Dy упорядочены ферромагнитно. Следовательно, неэквивалентность узлов (точнее, неэквивалентность окружения различных ионов Sn) должна возникать как реакция на замещение РЗ иона ионом Sn. Этот естественный вывод далеко не нов [5]. Он резко противоречит довольно широко распространенному мнению, что введение диамагнитной примеси почти не отражается на магнитной структуре окружения. Нам, однако, представляется, что вопрос о справедливости того или иного мнения в каждом конкретном случае может быть решен только после выяснения конкретного физического механизма, обуславливающего возможное изменение примесью магнитной структуры окружения.

Различные предлагавшиеся механизмы перечислены в [2], там же приведены соответствующие ссылки. В связи с этим нам представляется крайне существенным следующий вопрос. Почему в столь близких и по кристаллической, и по электронной структуре, и по магнитным свойствам металла — Tb и Dy — возникает столь кардинальное различие в реакции ближайшего окружения на введение примеси? Единственным, на наш взгляд, качественным различием между Tb и Dy является то обстоятельство, что в ферромагнитной области легкое направление намагничивания для Tb — ось b , а для Dy — ось a . Именно это обстоятельство наряду с возникающей вблизи примеси локальной магнитной анизотропией лежит в основе предлагаемого ниже объяснения указанных особенностей сверхтонких полей на ядрах примеси в РЗМ.

Хорошо известно, что РЗМ характеризуются исключительно высокой энергией одноосной магнитной анизотропии. Величина ее может вплотную подходить к 10^9 эрг/см³, составляя $1/4 \div 1/3$ обменной энергии. Весьма существенно при этом, что столь высокая величина энергии магнитной анизотропии связана в основном с большой величиной орбитального момента f -электронов, в то время как (по крайней мере, в тяжелых РЗМ) кристаллическое поле относительно слабо анизотропно. Дело в том, что в тяжелых РЗМ отношение параметров решетки c/a близко к идеальному значению $(c/a)_{ид} = \sqrt{8/3} \approx 1.633$, при котором решетка максимально плотно упакована, и все 12 ближайших соседей одинаково удалены от центрального узла. При этом симметрия кристаллического поля максимально близка к сферической, компонента Y_{20} потенциала обращается в нуль вместе с первой константой анизотропии. С физической точки зрения ясно, что, поскольку энергия магнитной анизотропии в РЗМ — это просто разность электростатических энергий, которыми обладает анизотропное зарядовое облако f -электронов при различных его ориентациях в кристаллическом поле, повышение симметрии последнего ведет к понижению магнитной анизотропии и наоборот. Математически это находит выражение в формуле для энергии взаимодействия f -электронов с кристаллическим полем

$$E_{кр} \sim (1.633 - c/a) e q_R \bar{r}_f^2 / a^3, \quad (1)$$

которой пропорциональна первая константа магнитной анизотропии. Кроме заряда электрона e , эффективного заряда РЗ иона q_R и среднего квадрата радиуса орбиты f -электрона \bar{r}_f^2 здесь стоит еще и малый множитель $(c/a)_{ид} - c/a \approx 0.05$ для Tb и Dy. Таким образом, из-за высокой симметрии окружения поля двенадцати ближайших соседей в тяжелых РЗМ, складываясь, дают слабо анизотропное кристаллическое поле.

Картина, однако, может кардинально измениться при появлении в первой координационной сфере примесного иона, например, Sn с эффективным зарядом q_{Sn} . Это эквивалентно появлению одного дополнительного заряда $(q_{Sn} - q_R)$, поле которого уже ничем не компенсируется и дает в энергию кристаллического поля добавку

$$E'_{кр} \sim e (q_{Sn} - q_R) \bar{r}_f^2 / a^3, \quad (2)$$

уже не содержащую малого множителя $(1.633 - c/a)$. Поэтому для каждого РЗ иона, имеющего соседом Sn, выделяется новая ось анизотропии — направление на примесь. Полагая валентность олова равной 4, так что $q_{Sn} - q_R$ для ионов R^{3+} порядка одного заряда электрона, приходим к выводу, что направление это должно являться трудным, а соответствующая константа анизотропии — на порядок превышать первую константу анизотропии в чистых РЗМ. В простейшем приближении, учитывая, что энергия локальной анизотропии в этом случае будет уже в несколько раз больше обменной энергии, мы можем предполагать теперь, что магнитные моменты РЗ узлов, являющихся ближайшими соседями Sn, могут вращаться лишь в плоскостях, перпендикулярных направлению из данного узла на примесь. Эти плоскости мы в дальнейшем будем называть «локальными легкими плоскостями».

Естественно, кроме локальной, остается и кристаллографическая магнитная анизотропия (энергии (1) и (2) складываются).

В Tb и Dy минимум энергии этой анизотропии достигается при расположении магнитных моментов параллельно базисной плоскости кристалла. На рис. 1 изображены локальные и кристаллографические легкие плоскости для трех ближайших соседей Sn: в той же гексагональной плоскости и плоскостях выше и ниже ее. В первом случае угол между локальной и кристаллографической легкой плоскостью составляет 90° , в двух последних он равен $\arctg(2a/c\sqrt{3}) \approx 36^\circ$.

В заключение этого раздела отметим, что если эффективный заряд примеси равен или близок к q_R , локальная анизотропия отсутствует или мала, и влияние примеси на магнитную структуру окружения должно заключаться в основном в изменении обменных интегралов. Если же эффективный заряд примеси существенно меньше q_R , для ее ближайшего окружения направление на примесь станет направлением легкого намагничивания. Если энергия локальной магнитной анизотропии в этом случае будет значительно превышать обменную энергию, моменты узлов ближайших соседей примеси станут изингоподобными — они смогут быть только параллельны или антипараллельны направлению на примесь.

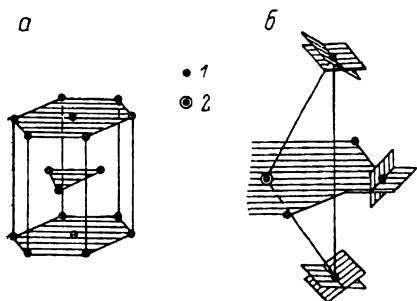


Рис. 1.

a — элементарная ячейка решетки тяжелых РЗМ (ГПУ), *b* — расположение локальных и кристаллографических легких плоскостей для трех типов РЗ узлов (1) — ближайших соседей примеси 2.

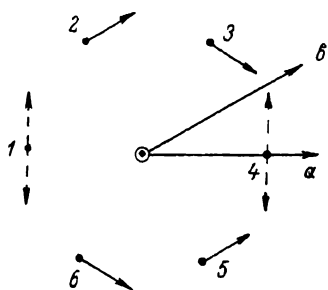


Рис. 2. Расположение магнитных моментов шести РЗ узлов — ближайших соседей примеси в той же плоскости, обеспечивающее минимум энергии.

Штриховыми линиями показаны фрустрированные в Ду моменты.

2. Фрустрация магнитных моментов

Естественно предполагать, что величина сверхтонкого поля на ядре примеси пропорциональна суммарному магнитному моменту ее окружения. Рассмотрим поэтому суммарный магнитный момент шести РЗ узлов — ближайших соседей Sn , лежащих в одной с ним гексагональной плоскости (рис. 2). Будем полагать, что влияние остальной части кристалла на моменты этих узлов сводится к созданию обменного поля вдоль направления легкого намагничивания, то есть вдоль оси a в Ду и вдоль оси b в Тб. Полагая, что момент каждого узла равен m и учитывая локальную анизотропию, получим, что суммарный момент в Тб в состоянии с низшей энергией

$$M_{Tb} = 2(1 + 2 \cos 60^\circ) m = 4m. \quad (3)$$

Любое отклонение узельных магнитных моментов от указанных на рис. 2 направлений связано в Тб с возрастанием энергии анизотропии и/или обменной энергии.

Совершенно другая ситуация имеет место в Ду, где намагниченность в основном объеме кристалла направлена вдоль оси a . Из рис. 2 видно, что в этом случае моменты 1 и 4 фрустрированы, так как энергия их не меняется при смене их направления на 180° . В результате возможны два состояния окружения Sn , обладающие одной энергией, но различным суммарным магнитным моментом. Если моменты 1 и 4 антипараллельны друг другу, то

$$M_{\uparrow\downarrow} = 4m \cos 30^\circ \simeq 3.46m. \quad (4)$$

В противоположном случае, когда моменты 1 и 4 параллельны,

$$M_{\uparrow\uparrow} = m \sqrt{(4 \cos 30^\circ)^2 + 2^2} = 4m. \quad (5)$$

Относительная величина разности моментов этих двух состояний

$$(M_{\uparrow\uparrow} - M_{\uparrow\downarrow})/M_{\uparrow\uparrow} \simeq 13.4\% \quad (6)$$

не слишком сильно отличается от разности наблюдаемых в Ду сверхтонких полей $(H_{\text{ст}}^{(1)} - H_{\text{ст}}^{(2)})/H_{\text{ст}}^{(1)} \approx 20\%$. Необходимо подчеркнуть и нулевую в данном приближении или относительно малую при более последовательном учете обменного взаимодействия разность энергий этих двух состояний. Это обстоятельство является весьма существенным, так как два сверхтонких поля в Ду наблюдаются вплоть до 6 К (более низкотемпературные измерения нам неизвестны, хотя они могут представлять значительный интерес).

3. Обсуждение результатов

Изложенный выше подход, хотя и дает возможность объяснить экспериментально наблюдаемую картину, оставляет неясными два весьма важных пункта. Во-первых, встает вопрос о величине намагниченности узлов *I* и *4* в Ду (рис. 2). Казалось бы, фрустрированный момент должен иметь нулевое среднее значение. Однако, ясно, что между основным объемом кристалла, где намагниченность параллельна оси *a*, и ближайшим окружением примеси существует более или менее широкая переходная область, где происходит постепенная смена направления намагниченности. Именно взаимодействие с моментами из этой области и приводит к ненулевой величине намагниченности узлов *I* и *4*.

Второй существенный вопрос — нужно ли учитывать при вычислении сверхтонкого поля намагниченность РЗ узлов — ближайших соседей Sn в верхней и нижней плоскостях. Если по каким-либо причинам (компенсация вкладов, анизотропия восприимчивости электронов проводимости и т. д.) вклад от этих соседей мал, то рассмотренная нами модель является более или менее удовлетворительной и в количественном отношении. Если же он входит наравне с вкладом от своей плоскости, каждое из значений $M_{\uparrow\uparrow}$ и $M_{\downarrow\downarrow}$ становится существенно больше, и относительная разность их в такой простой модели делается менее 4%. Это дает уже грубое расхождение с экспериментом, да и различие между Tb и Ду в смысле возможности существования нескольких спиновых конфигураций становится значительно менее резким.

В любом случае, однако, полное исследование этих вопросов требует тщательного анализа возможных распределений намагниченности вблизи примеси, и явится темой другой публикации. В данной работе мы ставили своей целью прежде всего указать на важность учета локальной магнитной анизотропии в РЗМ. Существенно заметить здесь, что, в зависимости от величины эффективного заряда примеси, эта локальная анизотропия может иметь тип «легкая ось» или «легкая плоскость» и достигать очень больших величин. Такое различие типов анизотропии может иметь принципиально важное значение для решения вопроса о существовании перехода в состояние спинового стекла [6].

Второй целью работы было указать на возможность того, что отличие между поведением Sn в Tb и Ду связано всего лишь с отличием их легких направлений в базисной плоскости. Это предположение очень просто проверить экспериментально: достаточно снимать ЯГР спектр в сильном (сильнее поля анизотропии в базисной плоскости) внешнем магнитном поле. Это поле должно быть направлено вдоль оси *a* в Tb и вдоль *b* — в Ду. Если наше предположение верно, спектр Tb в таком эксперименте будет размытым, а спектр Ду — нет.

Авторы благодарны С. К. Годовикову за обсуждение.

Л и т е р а т у р а

- [1] Godovikov S. K., Kozin M. G., Turoutsev V. V. Shpinel V. S. Phys. St. Sol. (b), 1976, vol. 78, N 1, p. 103—111.
- [2] Богданов П. В., Годовиков С. К., Козин М. Г., Туровцев В. В., Шпинель В. С. ЖЭТФ, 1976, т. 72, № 6, с. 2120—2129.
- [3] Годовиков С. К., Богданов П. В., Козин М. Г., Морева Н. И. ФТТ, 1981, т. 23, № 4, с. 990—997.

- [4] Годовиков С. К., Метлушко В. В., Морева Н. И., Фиров А. И. ФТТ, 1978, т. 29, № 3, с. 685—691.
- [5] Forker M., Hammesfahr A. Z. Physik, 1973, vol. 260, N 1, p. 131—146.
- [6] Yeshurun Y., Ketelsen L. J. P., Salamon M. B. Phys. Rev., 1985, vol. 32, N 11, p. 7425—7429.

Институт физики металлов
УНЦ АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
23 июля 1987 г.

