

УДК 538.221

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИОНОВ САМАРИЯ

О. А. Дорофеев, А. И. Попов

Самариевый феррит-гранат $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ обладает интересными свойствами, описание которых предъявляет весьма жесткие требования к величинам параметров кристаллического поля B_k^q , действующего на ионы Sm^{3+} . В работе численными методами определен набор параметров B_k^q , удовлетворяющий экспериментальным данным по намагниченности самариевой подсистемы и ориентационным фазовым переходам. Предложен неравновесный термодинамический потенциал, описывающий особенности поведения магнитных свойств $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

Самариевый феррит-гранат $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ обладает весьма интересными магнитными свойствами. Так, в частности, при аномально малом значении намагниченности насыщения самариевой подрешетки ($M_{\text{Sm}}=0.14 \mu_B/\text{ион}$ [1]) магнитная анизотропия $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ является наибольшей в ряду редкоземельных ферритов-гранатов (при 78 К). $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ обладает двумя спонтанными ориентационными фазовыми переходами, один из которых $\langle \omega 0 \rangle \leftrightarrow \langle 110 \rangle$ является фазовым переходом второго рода и происходит при $T_1=18$ К, а другой переход $\langle 110 \rangle \leftrightarrow \langle 111 \rangle$ является фазовым переходом первого рода и происходит при $T_2=65$ К [2].

Качественное объяснение магнитных фазовых переходов в $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ было дано в [2]. В этой работе показано, что наблюдаемые на опыте ориентационные фазовые переходы удастся объяснить исходя из предположения о сильной анизотропии g -тензора основного дублета иона Sm^{3+} . А именно $|g_x| \gg |g_y|, |g_z|$, где g_α — диагональные компоненты g -тензора относительно локальной системы координат.¹ Отсюда вытекает, что собственные функции основного дублета иона Sm^{3+} (основной мультиплет $J=5/2$) в $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ близки к функциям $\Psi_{1,2} = |5/2, \pm 5/2\rangle$ либо $\Psi_{1,2} = |5/2, \pm 3/2\rangle$.

Количественное описание особенностей магнитных свойств самариевого феррита-граната требует знания электронной структуры $4f$ -оболочки ионов Sm^{3+} в $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, которая формируется в основном под влиянием кристаллического поля и обменного взаимодействия ионов Sm^{3+} с ионами Fe^{3+} . Таким образом, в данном случае актуальным гамильтонианом задачи является

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{лп}} + \mathcal{H}_{\text{об}}, \quad (1)$$

где

$$\mathcal{H}_{\text{лп}} = \sum_{kq} B_k^q (C_q^k + C_{-q}^k); \quad k=2, 4, 6; \quad |q|=0, 2, 4, 6; \quad q \leq k$$

представляет собой гамильтониан кристаллического поля; $C_{[q]}^k$ — неприводимые тензорные операторы [4]; $\mathcal{H}_{\text{об}} = 2\mu_B \text{SH}_{\text{об}}$ — гамильтониан обменного $\text{Sm}-\text{Fe}$ -взаимодействия в изотропном приближении; $\mu_B N_{\text{об}}/k_B = 29$ К [3].

¹ Ориентация локальных осей симметрии окружения $e_\alpha^{(r)}$ всех шести неэквивалентных мест соответствует принятой в работе [3].

Известно, что для $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ попытки экстраполяции параметров кристаллического поля по гомологическому ряду гранатов в рамках суперпозиционной модели оказались неудачными. Это объясняется необычайно сильным проявлением по сравнению с другими гранатами эффекта корреляции кристаллического поля [5]. В [6] был предложен набор параметров B_k^q , наиболее удачно описывающий экспериментальные данные (первая строка табл. 1). Отметим, что основное состояние иона Sm^{3+} в этом случае близко к $|5/2, \pm 5/2\rangle$. Однако рассчитанные с помощью этих параметров величины $T_{1,2}$ значительно отличаются от наблюдаемых, а M_{Sm} почти в два превышает опытное значение (табл. 2).² Поэтому целью

Таблица 1

Параметры кристаллического поля $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (в см^{-1})

B_2^0	B_2^2	B_4^0	B_4^2	B_4^4	B_6^0	B_6^2	B_6^4	B_6^6
-171	181	-2250	242	1009	870	-171	1297	77
240	184	1460	540	370	0	0	0	0

Таблица 2

Магнитные характеристики $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

$M_{\text{Sm}}, \mu_B/\text{ион}$		T_1, K $\langle 110 \rangle \leftrightarrow \langle 1\bar{1}0 \rangle$	T_2, K $\langle 110 \rangle \leftrightarrow \langle 111 \rangle$	Ссылка
0 К	20 К			
0.21	—	29	51.4	[5]
0.149	0.139	15	63	Наст. раб.
0.14	0.138	18.2	65.6	[1-2, 7]

данной работы являлось определение параметров B_k^q , удовлетворяющих опытным значениям $M_{\text{Sm}}, T_{1,2}$. Из сказанного выше вытекает, что основное состояние иона Sm^{3+} должно быть близким к $|5/2, \pm 3/2\rangle$, поскольку оно обеспечивает существенно меньшее значение M_{Sm} , нежели $|5/2, \pm 5/2\rangle$. Можно показать, что состояние $|5/2, \pm 3/2\rangle$ будет основным, если

$$B_2^2 = B_2^0 \sqrt{5/33} \sqrt{3}, \quad B_4^2 = 0,$$

$$3(11B_2^2 + 15B_4^2) > [(99B_2^2 - 5B_4^2)^2 + 20(11\sqrt{3}B_2^2 + 3B_4^2)^2]^{1/2}. \quad (2)$$

Соотношения (2) послужили отправной точкой численного поиска величин B_k^q методом Монте-Карло, удовлетворяющих указанным выше опытным данным. Расчет сводился к диагонализации матрицы оператора (1) в пространстве функций $|Jm_J\rangle$, где $J=5/2, 7/2$; $-J \leq m_J \leq J$ в локальной системе координат каждого редкоземельного иона с последующим вычислением термодинамического потенциала (ТП) и его анализом. Результаты численного поиска приведены в табл. 1, 2.

Как показывают расчеты, задача согласования результатов поиска с экспериментальными данными предъявляет весьма жесткие требования к параметрам B_2^2 и B_4^2 , что в значительной степени уменьшает произвол их выбора.³ Параметры B_6^q не оказывают существенного влияния на пове-

² Нами был проведен анализ влияния анизотропии обменного $\text{Sm}-\text{Fe}$ -взаимодействия на величину M_{Sm} . Оказалось, что для типичных значений параметров анизотропного $\text{R}-\text{Fe}$ -обмена оно несущественно.

³ Результаты согласования рассчитанных величин с опытными данными устойчивы относительно изменения параметров B_2^2, B_4^2 на величины $\sim 30, \sim 5 \text{ см}^{-1}$ соответственно.

дене $T_1, 2, M_{Sm}$, поэтому в рамках данной задачи мы их не определяем. В данной работе мы проверили, насколько согласуются найденные величины $B_{\frac{1}{2}}$ с температурной зависимостью угла отклонения вектора намагниченности в плоскости (001) от оси [100] в фазе $\langle uv0 \rangle$. Сопоставление результатов теории и эксперимента показывает их согласие (см. рисунок).

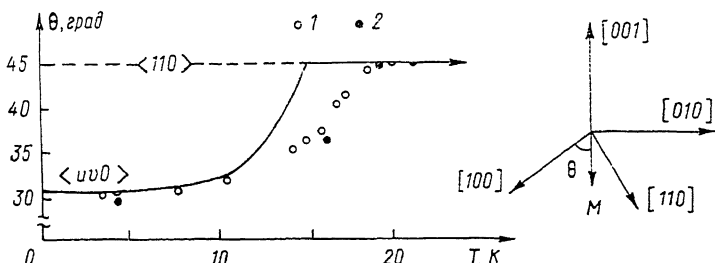
Приведенные выше результаты можно также получить исходя из анализа следующего неравновесного ТП: ⁴

$$\Phi = K_1 (\gamma_x^2 \gamma_y^2 + \gamma_y^2 \gamma_z^2 + \gamma_z^2 \gamma_x^2) - 1/2 \sum_r \ln [\text{ch} (\mu H_{00}^{(r)z} / T)] + \\ + 1/2 \sum_r m_z^{(r)} H_{00}^{(r)z} (a_x H_{00}^{(r)x} + a_y H_{00}^{(r)y}), \quad (3)$$

где

$$m_z^{(r)} = \mu \text{th} (\mu H_{00}^{(r)z} / T)$$

— величина составляющей магнитного момента иона Sm^{3+} в r -м узле, обусловленной расщеплением основного дублета этого иона в обменном



Температурная зависимость угла отклонения вектора намагниченности в плоскости (001).

1 — измерение вращающего момента, 2 — намагниченности [2]. Сплошная линия — теоретическая кривая.

поле; μ — значение этой величины при 0 K; $\gamma = M_{Fe} / M_{Fe}$; $H_{00}^{(r)} = H_{00} e_{\alpha}^{(r)}$; a_x и a_y — численные коэффициенты. Первое слагаемое в (3) описывает вклад в анизотропию от возбужденных уровней ионов Sm^{3+} , возникающий в четвертом порядке теории возмущений, и анизотропию железной подрешетки. Второе слагаемое является вкладом основного «изинговского» дублета иона Sm^{3+} . Последнее слагаемое в (3) представляет собой анизотропный вклад членов третьего порядка теории возмущений. Это слагаемое не учитывалось в [2], что, в частности, не позволило объяснить экспериментально наблюдаемую разницу температур фазовых переходов $T_2 - T_1$ $Sm_3Fe_5O_{12}$.

Список литературы

- [1] Geller S., Williams H. J., Sherwood R. C., Remaika J. P., Espinosa G. P. // Phys. Rev. 1963. V. 131. N 3. P. 1080—1082.
- [2] Бабушкин Г. А., Бородин В. А., Дорошев В. Д., Звездин А. К., Левитин Р. З., Попов А. И. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 35. № 1. С. 28—31.
- [3] Nekvasil V. // Czech. J. Phys. 1984. B. 34. P. 1052—1059.
- [4] Wybourne B. G. Spectroscopic properties of rare earths. N. Y., 1965. P. 236.
- [5] Nekvasil V. // Czech. J. Phys. 1979. B. 29. P. 785—796.
- [6] Nekvasil V., Guillot M., Marchand A., Tcheou F. Single-ion theory of the magnetic phase transition in SmIG (in print).
- [7] Guillot M., Le Gall H., Marchand A. // IEEE Trans. 1986. V. MAG-22. N 5. P. 1239—1241.

Московский институт электронной техники
Москва

Поступило в Редакцию
1 февраля 1989 г.
В окончательной редакции
5 июня 1989 г.

⁴ Данный ТП можно получить, используя теорию возмущений по $\| \mathcal{H}_{00} \| / \Delta \ll 1$, где Δ — энергетический интервал, отделяющий основное состояние иона Sm^{3+} от возбужденных. В нашем случае $\Delta \sim 80 \text{ см}^{-1}$, $\| \mathcal{H}_{00} \| \sim 30 \text{ см}^{-1}$.