

# Магнитная структура $\text{Er}_5\text{Ge}_3$ при 4.2 К

© А.П. Вохмянин, Ю.А. Дорофеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: avokhm@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 6 сентября 2002 г.

В окончательной редакции 17 января 2003 г.)

На основе результатов измерений упругого магнитного рассеяния нейтронов, осуществленных при 4.2 К, выполнен симметричный анализ возможных магнитных структур в основном состоянии  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$ . Показано, что наименьший фактор расходимости  $R_m \approx 9.5\%$  соответствует модулированной коллинеарной магнитной структуре, в которой магнитные моменты атомов Er направлены вдоль оси  $\mathbf{a}_3$  элементарной кристаллической ячейки и образуют антиферромагнитную продольную спиновую волну (AFLSW). Магнитная структура характеризуется волновым вектором  $\mathbf{k} = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ , где  $\mu \approx 0.293$ , и периодом модуляции  $\lambda \approx 3.413a_3$ . В результате исследований температурной зависимости интенсивностей магнитных отражений определена температура магнитного разупорядочения  $T_N$ , равная  $\sim 38$  К.

Работа выполнена при поддержке Министерства промышленности, науки и технологий Российской Федерации (гос. контракт № 40.012.1.1.1150).

В ряде работ [1–9] опубликованы результаты исследований магнитной структуры интерметаллических соединений  $\text{R}_5\text{M}_3$ , где R — редкоземельный элемент (Tb, Nd, Ho, Dy, Er), а M — Ge, Sb, Si или Sn.  $\text{Tb}_5\text{Ge}_3$  [1],  $\text{Nd}_5\text{Ge}_3$  [2],  $\text{Tb}_5\text{Sb}_3$  [3],  $\text{Tb}_5\text{Si}_3$  [4],  $\text{Ho}_5\text{Sb}_3$  [5],  $\text{Dy}_5\text{Sb}_3$  [6],  $\text{Nd}_5\text{Sn}_3$  [7],  $\text{Er}_5\text{Si}_3$  [8] и  $\text{Tb}_5\text{Sn}_3$  [9] имеют кристаллическую структуру, описываемую пространственной группой  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ . Атомы R расположены в 4(d)- и 6(g)-позициях, а атомы Ge, Sb, Si и Sn — в 6(g)-позициях.  $\text{Tb}_5\text{Ge}_3$  [1],  $\text{Tb}_5\text{Si}_3$  [4],  $\text{Dy}_5\text{Sb}_3$  [6] при низких температурах,  $\text{Tb}_5\text{Sb}_3$  [3] в интервале температур  $80 \text{ K} \leq T \leq 150 \text{ K}$  и  $\text{Tb}_5\text{Sn}_3$  [9] при  $T = 55 \text{ K}$  имеют магнитную структуру с волновым вектором  $\mathbf{k} = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ .  $\text{Nd}_5\text{Ge}_3$  [2],  $\text{Ho}_5\text{Sb}_3$  [5],  $\text{Nd}_5\text{Sn}_3$  [7] и  $\text{Er}_5\text{Si}_3$  [8] при низких температурах имеют магнитную структуру с волновым вектором  $\mathbf{k} = 2\pi(\mu/a_1, 0, 0)$ . Здесь введены параметры  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_3$  как основные периоды прямой решетки в соответствии с [10] ( $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  соответствуют общепринятым  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ ). Конкретные значения  $\mu$ , определенные в каждом случае, можно найти в указанных источниках.

Одним из существенных недостатков работ [1–9], по мнению авторов настоящего исследования, является отсутствие систематического симметричного анализа изученных в них магнитных структур. В настоящей работе описываются результаты нейтронографического определения магнитной структуры интерметаллида  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$ , который является кристаллографическим аналогом упомянутых выше соединений, особое внимание уделяется именно результатам симметричного анализа магнитных структур, возможных в интерметаллидах подобного типа.

Изучаемый объект (как и соединения, исследованные в [1–9]) удобен для проведения нейтронографических исследований и симметричного анализа возможных магнитных структур из-за относительной простоты кристал-

лической структуры и небольшого числа магнитоактивных атомов, входящих в элементарную кристаллическую ячейку. Некоторые неудобства возникают из-за того, что эти атомы находятся в кристаллографических позициях двух типов. Последнее обстоятельство несколько усложняет рассматриваемую проблему, но это не очень принципиально. Полученные результаты симметричного анализа можно распространить на все соединения с магнитоактивными атомами, занимающими 4(d)- и 6(g)-позиции, если эти соединения имеют кристаллическую структуру, описываемую пространственной группой  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ , и магнитную структуру с соответствующим волновым вектором.

## 1. Методика эксперимента

Поликристаллический образец  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$ , использованный при нейтронографических исследованиях, был предоставлен сотрудниками кафедры общей физики Уральского государственного технического университета им. С.М. Кирова (г. Екатеринбург). Нейтронографические измерения осуществлялись на двух дифрактометрах ( $\lambda \approx 1.805$  и  $2.4232 \text{ \AA}$  соответственно), установленных на горизонтальных пучках реактора ИВВ-2М, при температурах 293, 80 и 4.2 К. Порошкообразный образец засыпался в ванадиевый контейнер диаметром 8 и высотой 60 мм. Нейтронограммы, снятые при 293 и 80 К, существенных различий не имеют. Они (на рис. 1 и 2 приведены нейтронограммы, полученные при температурах жидкого азота и жидкого гелия на установке с  $\lambda \approx 2.4232 \text{ \AA}$ , обладающей более высокой разрешающей способностью) анализировались с использованием программы „Fullprof“, которая в настоящее время является общепринятой при анализе дифрактометрических данных. Съемка нейтронограмм в области малых углов рассеяния ( $2\Theta = 2-10^\circ$ ), осуществленная с большой

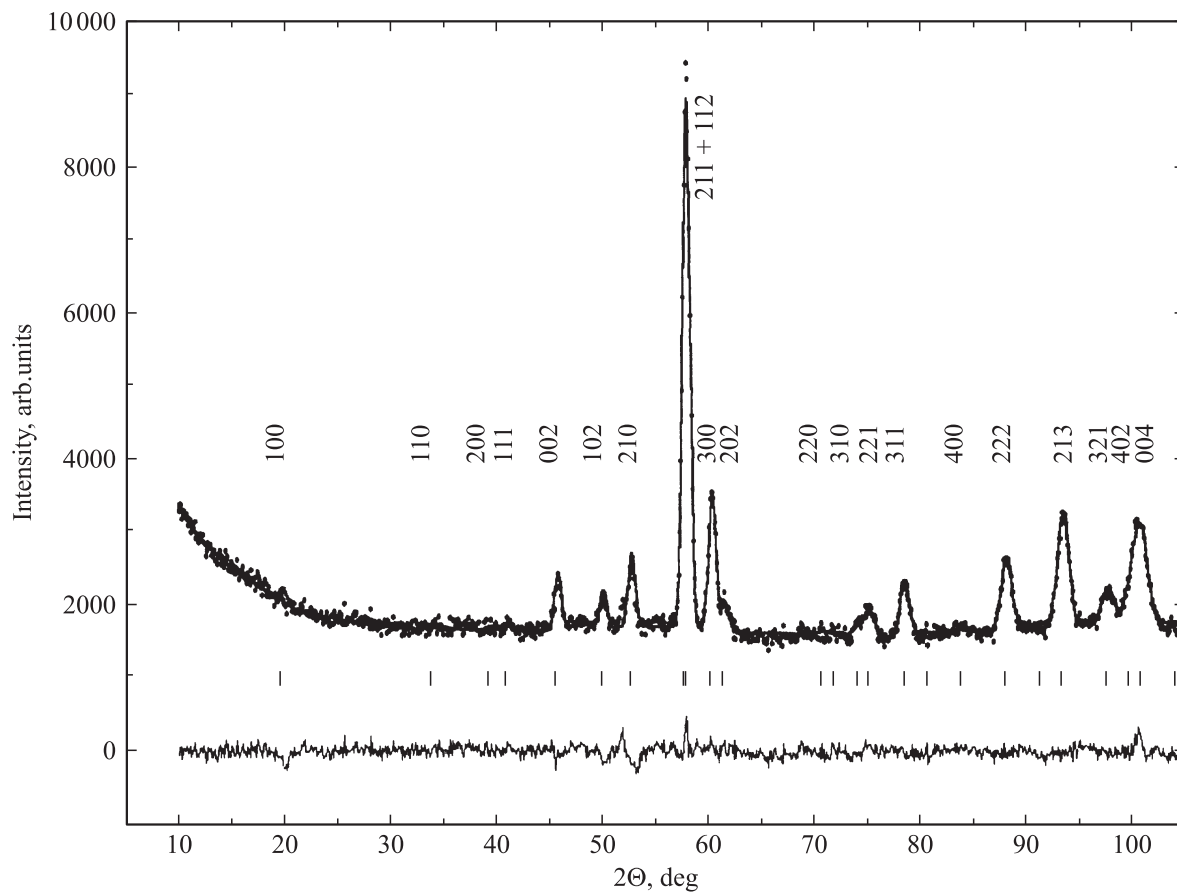


Рис. 1. Нейтронограмма  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$  при 80 К.

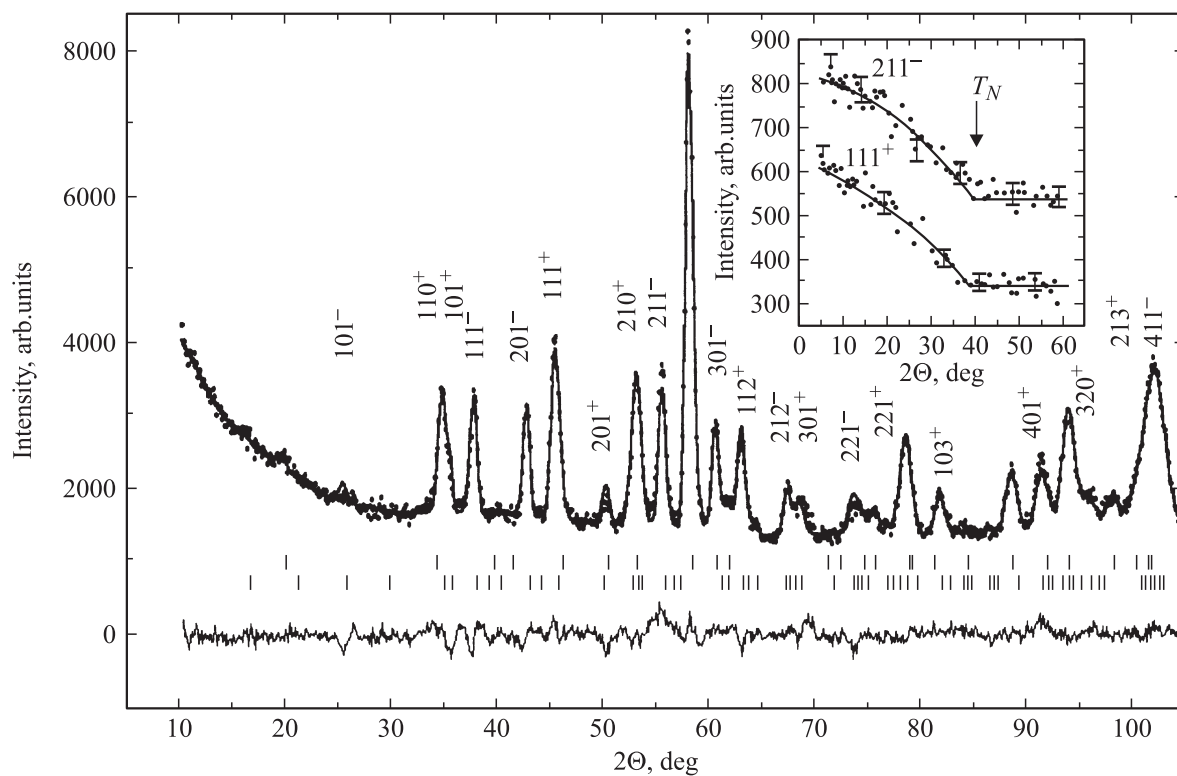


Рис. 2. Нейтронограмма  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$  при 4.2 К. На вставке — зависимость интенсивностей отражений  $(111)^+$  и  $(211)^-$  от температуры.

экспозицией, показала отсутствие каких-либо отражений в этом интервале углов. Поэтому малоугловые участки нейтронограмм на рис. 1 и 2 не приводятся.

Пробные модели магнитной структуры конструировались из базисных функций неприводимых представлений группы  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ , входящих в состав магнитного представления с волновым вектором, определенным при индцировании нейтронограмм, полученных при низкой температуре. Используемая методика расчета базисных функций подробно описана в [11]. При описании этой методики мы сохраняем систему обозначений, использованную в [11].

## 2. Кристаллическая структура

Анализ нейтронограмм, полученных при 80 и 4.2 К (рис. 1 и 2), приводит к заключению, что  $Er_5Ge_3$  при этих температурах имеет кристаллическую структуру с пространственной группой  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ . В соответствии с [12], атомы ErI занимают 4(*d*)-позиции с координатами 1(1/3, 2/3, 0), 2(1/3, 2/3, 1/2), 3(2/3, 1/3, 0) и 4(2/3, 1/3, 1/2), а атомы ErII — 6(*g*)-позиции с координатами 1(*x*, 0, 0.25), 2(0, *x*, 0.25), 3( $\bar{x}$ ,  $\bar{x}$ , 0.25), 4( $\bar{x}$ , 0, 0.75), 5(0,  $\bar{x}$ , 0.75), 6(*x*, *x*, 0.75), где  $x \approx 0.240$ . Атомы Ge занимают тоже позиции 6(*g*), но в этом случае  $x \approx 0.605$ . Таким образом, элементарная ячейка содержит в себе 16 атомов, т.е. две формульные единицы. Расчет привел к следующим результатам: при  $T \approx 80$  К  $a_1 = a_2 \approx (8.414 \pm 0.003)$  Å,  $a_3 \approx (6.306 \pm 0.002)$  Å,  $x_{Er}(6(g)) \approx 0.244$ ,  $x_{Ge} \approx 0.606$ ,  $R_B \approx 7.41\%$ ,  $R_f \approx 10.4\%$ ; при  $T \approx 4.2$  К  $a_1 = a_2 \approx (8.390 \pm 0.002)$  Å,  $a_3 \approx (6.279 \pm 0.002)$  Å,  $x_{Er}(6(g)) \approx 0.240$ ,  $x_{Ge} \approx 0.605$ ,  $R_B \approx 4.22\%$ ,  $R_f \approx 5.66\%$ .

## 3. Магнитная структура

3.1. Волновой вектор магнитной структуры. Соединения, имеющие кристаллическую структуру, описываемую пространственной группой  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ , относятся к гексагональной сингонии. В [10] можно найти перечень векторов — представителей звезд волновых векторов, допустимых в гексагональной сингонии. Здесь воспроизводится перечень этих звезд волновых векторов с использованием системы обозначений звезд, принятой в [11]

$$\begin{aligned} \{\mathbf{k}_1\} &= \mu\mathbf{b}_1 + \nu\mathbf{b}_2; & \{\mathbf{k}_2\} &= \mu\mathbf{b}_1 + \nu\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3/2; \\ \{\mathbf{k}_3\} &= \mu\mathbf{b}_1 + \nu\mathbf{b}_3; & \{\mathbf{k}_4\} &= \mu(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) + \nu\mathbf{b}_3; & \{\mathbf{k}_5\} &= \mu\mathbf{b}_1; \\ \{\mathbf{k}_6\} &= \mu(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2); & \{\mathbf{k}_7\} &= \mu\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3/2; \\ \{\mathbf{k}_8\} &= \mu(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) + \mathbf{b}_3/2; & \{\mathbf{k}_9\} &= \mathbf{b}_1/2 + \mu\mathbf{b}_3; \\ \{\mathbf{k}_{10}\} &= (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/3 + \mu\mathbf{b}_3; & \{\mathbf{k}_{11}\} &= \mu\mathbf{b}_3; & \{\mathbf{k}_{12}\} &= \mathbf{b}_1/2; \\ \{\mathbf{k}_{13}\} &= (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/3; & \{\mathbf{k}_{14}\} &= (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3)/2; \\ \{\mathbf{k}_{15}\} &= (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/3 + \mathbf{b}_3/2; & \{\mathbf{k}_{16}\} &= 0; & \{\mathbf{k}_{17}\} &= \mathbf{b}_3/2. \end{aligned}$$

В этих выражениях  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  — обозначения основных векторов обратной решетки, использованные в [10] и соответствующие общепринятым  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ .

Сравнение нейтронограмм, снятых с  $Er_5Ge_3$  при 4.2 и 80 К, позволяет сделать вывод, что на нейтронограмме, полученной при низкой температуре, наблюдаются чисто магнитные отражения, которым нельзя приписать целочисленные значения индексов Миллера (*hkl*) на основе элементарной кристаллической ячейки.

Анализ углового положения магнитных отражений (в данном случае спутеллитов) на нейтронограмме  $Er_5Ge_3$ , полученной при 4.2 К, привел к заключению, что  $Er_5Ge_3$  при этой температуре обладает магнитной структурой, описываемой волновым вектором  $\mathbf{k} = \mu\mathbf{b}_3 = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ , где  $\mu \approx 0.293$ . Магнитные структуры с волновыми векторами подобного типа принято называть несоизмеримыми, или модулированными [11,13,14].

3.2. Симметричный анализ магнитных структур, возможных в соединениях с пространственной группой  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$  и звездой волнового вектора  $\{\mathbf{k}_{11}\} = \mu\mathbf{b}_3$ . В данном разделе приводится очень краткое описание методики симметричного анализа магнитной структуры соединений с кристаллической структурой, относящейся к пространственной группе  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ , с атомами, занимающими 4(*d*)- и 6(*g*)-позиции, на примере  $Er_5Ge_3$ . Особое внимание уделяется описанию этой методики из-за крайне редкого использования симметричных соображений на практике и необходимости популяризации применения методов симметричного анализа в нейтронографии магнетиков.

Волновой вектор  $\mathbf{k} = \mu\mathbf{b}_3 = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ , указанный выше, является одним из лучей двухлучевой звезды  $\{\mathbf{k}_{11}\} = \mu\mathbf{b}_3$  [10]. Понятие звезды волнового вектора и ее лучей можно найти в [11].

Перед выполнением расчетов из [10] выписывается таблица нагруженных неприводимых представлений для случая  $\{\mathbf{k}_{11}\} = \mu\mathbf{b}_3 = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ . Эта таблица содержит в себе четыре одномерных ( $\tau_1 - \tau_4$ ) и два двумерных ( $\tau_5, \tau_6$ ) неприводимых представления. Неприводимые представления  $\tau_5$  и  $\tau_6$ , содержащие в себе комплексные величины

$$\omega = \exp(i\pi/3) = (1 + i\sqrt{3})/2,$$

$$\omega^2 = \exp(2i\pi/3) = (-1 + i\sqrt{3})/2,$$

$$\omega^4 = \exp(4i\pi/3) = (-1 - i\sqrt{3})/2$$

и

$$\omega^5 = \exp(5i\pi/3) = (1 - i\sqrt{3})/2,$$

приводятся к вещественному виду с помощью унитарной матрицы

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad u^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}.$$

В дальнейшем используются приведенные к вещественному виду матрицы неприводимых представлений. В [10] указано, что в случае группы  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$  элементы симметрии  $H_1, H_3, H_5, H_{20}, H_{22}, H_{24}$  имеют сопровождающую трансляцию  $\tau_h = 0$ , а элементы  $H_2, H_4, H_6, H_{19}, H_{21}, H_{23} - \tau = (0, 0, \mathbf{a}_3/2)$ . Перечисленные здесь элементы симметрии образуют группу волнового вектора  $\mathbf{k} = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$ . Умножая проективные (т.е. нагруженные неприводимые) представления на  $\exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_h)$ , получаем малые представления (см. [11]). В дальнейшем используются величины, комплексно сопряженные с малыми представлениями.

Далее в  $4(d)$ - и  $6(g)$ -позициях рекомендуется совершить переход от системы координат ( $I$ ), использованной в [12], к системе координат ( $K$ ), использованной в [10]. Связь между указанными системами для группы  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$  приведена в [10] ( $(XYZ)K = (XYZ)I - (0, 0, 0.25)$ ). Для каждой из позиций ( $4(d)$  и  $6(g)$ ) составляется таблица перестановок атомов под действием элементов группы волнового вектора.

Кратность вхождения неприводимого магнитного представления в приводимое определяется по формуле

$$n_\nu = \frac{1}{n(G_k^0)} \sum_{h \in G_k^0} \chi_M^k(g) \chi^{*\nu}(g),$$

где  $n(G_k^0)$  — число элементов точечной группы волнового вектора  $G_k^0$ ,

$$\chi_M^k(g) = \delta_h S_p R^h \sum_j \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{a}_p(g, j)] \delta_{j,gi}$$

— характер магнитного представления,

$$\sum_j \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{a}_p(g, j)] \delta_{j,gi} = \chi_p^k$$

— характер перестановочного представления;  $\delta_h = 1$ , если  $h$  — обычный поворот, и  $\delta_h = -1$ , если  $h$  — инверсионный поворот;  $R^h$  — матрица поворотного преобразования,  $\mathbf{a}_p$  — возвращающая трансляция,  $\delta_{j,gi}$  —  $\delta$ -символ Кронекера,  $\chi^{*\nu}$  — характер неприводимого представления  $d^{*\nu}$ .

В результате выполненных вычислений получен состав магнитного представления для  $4(d)$ - и  $6(g)$ -позиций

$$d_M^{k_{11}}(4(d)) = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 + 2(\tau_5 + \tau_6),$$

$$d_M^{k_{11}}(6(g)) = \tau_1 + 2(\tau_2 + \tau_3) + \tau_4 + 3(\tau_5 + \tau_6).$$

По формуле

$$S \left( \begin{matrix} kv \\ \lambda \end{matrix} \middle| i \right) = \sum_{h \in G_k^0} d_{\lambda|\mu}^{*kv}(g) \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{a}_p(g, j)] \delta_{i,gi} \begin{pmatrix} R_{x|\beta}^h \\ R_{y|\beta}^h \\ R_{z|\beta}^h \end{pmatrix},$$

взятой из [11], получены базисные функции неприводимых представлений группы  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ , входящих в состав магнитного представления с  $\{\mathbf{k}_{11}\} =$

$= \mu\mathbf{b}_3 = 2\pi(0, 0, \mu/a_3)$  (для луча  $\mathbf{k}_1 = \mu\mathbf{b}_3$ ), в случае  $4(d)$ - и  $6(g)$ -позиций. Эти величины в рассматриваемом случае являются комплексными.

Поскольку магнитные моменты, образующие магнитную структуру, вещественны, базисные функции неприводимых представлений должны быть получены также в виде вещественных величин. Для этой цели в [11] рекомендуется найти базисные функции для луча  $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$  с помощью выражения

$$S \left( \begin{matrix} k_L v \\ \lambda \end{matrix} \middle| i' \right) = \exp[-i\mathbf{k}_L \mathbf{a}_p(g_L, i)] \delta_{h_L} R^{h_L} S \left( \begin{matrix} kv \\ \lambda \end{matrix} \middle| i \right)$$

и создать линейную комбинацию (осуществить межлучевое смешивание) базисных функций неприводимых представлений, полученных для лучей  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$ , с коэффициентами смешивания, обеспечивающими вещественность магнитного момента каждого атома во всех позициях для каждого неприводимого представления. Для перехода от луча  $\mathbf{k}_1$  к лучу  $\mathbf{k}_2$  использовались в  $4(d)$ -позиции элемент  $\{H_{13}|0\}$ , а в позиции  $6(g)$  —  $\{H_7|0\}$ . В нулевой (исходной) ячейке кристалла вещественность рассматриваемых величин достигнута следующим образом:

$$S_{0i}(4(d)) = [S_{0i}^{k_1}(4(d)) + \varepsilon S_{0i}^{k_2}(4(d))] / 2,$$

где  $\varepsilon = \exp(-i\pi\mu)$ ,

$$S_{0i}(6(g)) = [S_{0i}^{k_1}(6(g)) + S_{0i}^{k_2}(6(g))] / 2$$

(здесь использована сокращенная форма записи обозначений). Простота выражения для  $S_{0i}(6(g))$  объясняется тем, что величины  $S_{0i}^{k_1}(6(g))$  и  $S_{0i}^{k_2}(6(g))$  оказались комплексно сопряженными, в связи с чем коэффициенты смешивания для них оказались одинаковыми и равными  $1/2$ . В конце расчета осуществлен обратный переход к системе координат, использованной в [12].

Предварительный анализ результатов выполненных расчетов приводит к выводу, что в рассматриваемом случае нет никакой возможности добиться равенства величин магнитных моментов атомов, расположенных во всех различающихся значением координаты  $z$  узлах каждого из рассматриваемых типов ( $4(d)$  или  $6(g)$ ) позиций пространственной группы  $D_{6h}^3(P6_3/mcm)$ . В связи с этим, они могут образовывать несколько вариантов магнитных структур, относящихся к типу спиновых волн: 1) продольную (когда магнитные моменты параллельны оси  $\mathbf{a}_3$  и волновому вектору  $\mathbf{k}$  рассматриваемой магнитной структуры) спиновую волну, 2) поперечную (когда магнитные моменты перпендикулярны этой же оси и этому же волновому вектору) спиновую волну (в случае справедливости концепции одного неприводимого представления [11]), а также 3) их векторную сумму (в случае необходимости использования базисных функций, обеспечивающих одновременное наличие проекций магнитного момента и на базисную плоскость, и на ось  $\mathbf{a}_3$  элементарной кристаллической ячейки).

3.3. Магнитная структура. Расчеты, выполненные с использованием программы „Fullprof“, позволили сделать следующие выводы. В  $4(d)$ -позиции магнитная структура образуется по неприводимому представлению  $\tau_3$ , а в  $6(g)$ -позиции — по представлению  $\tau'_3$ . Этот вариант приводит к минимальному значению считающихся критерием достоверности полученных результатов факторов расходимости для кристаллической и магнитной структур.

Поскольку в случае атомов, расположенных в  $4(d)$ -позиции,

$$S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 1\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 3\right) = S(0, 0, 1),$$

а

$$S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 2\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 4\right) = S(0, 0, \bar{1}) \operatorname{Re} \varepsilon$$

(здесь обозначение  $S(0, 0, 1)$  соответствует случаю, когда атомный магнитный момент направлен вдоль оси  $\mathbf{a}_3$ , а  $S(0, 0, \bar{1})$  — случаю, когда он имеет противоположное направление) и  $-\operatorname{Re} \varepsilon = -\cos \pi\mu = \cos(\pi + \pi\mu)$ , то очевидно, что магнитные моменты  $\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\mu}_3$  и  $\boldsymbol{\mu}_4$  образуют продольную спиновую волну, причем моментам  $\boldsymbol{\mu}_1$  и  $\boldsymbol{\mu}_3$  можно приписать фазу  $\varphi = 0$ , а моментам  $\boldsymbol{\mu}_2$  и  $\boldsymbol{\mu}_4$  — фазу, равную  $\pi + \pi\mu$ . Последняя соответствует тому, что моменты  $\boldsymbol{\mu}_2$  и  $\boldsymbol{\mu}_4$  антипараллельны моментам  $\boldsymbol{\mu}_1$  и  $\boldsymbol{\mu}_3$  и сокращены по модулю за счет множителя  $\operatorname{Re} \varepsilon = \cos \pi\mu$ .

Аналогичные результаты получены для атомов, расположенных в  $6(g)$ -позиции,

$$S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 1\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 2\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 3\right) = S(0, 0, 1)$$

и

$$S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 4\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 5\right) = S\left(\begin{matrix} k_{11}\tau'_3 \\ \lambda \end{matrix} \middle| 6\right) \\ = S(0, 0, \bar{1}) \cos \pi\mu = S(0, 0, 1) \cos(\pi + \pi\mu).$$

Полученную модель магнитной структуры следует назвать антиферромагнитной продольной спиновой волной (AFLSW).

Кроме того, для достижения лучшего (минимального) фактора расходимости для магнитной структуры, получаемого при расчетах с использованием программы „Fullprof“, всем атомным магнитным моментам в  $6(g)$ -позиции приходится приписывать дополнительный фазовый сдвиг относительно  $4(d)$ -позиции. Этот сдвиг в результате расчета получился равным  $\Delta\varphi \approx (-0.508 \pm 0.022)\pi$ , но у авторов нет физических оснований считать его отличающимся от  $-\pi/2$ .

Зная  $\mathbf{k}$ , можно определить период продольной спиновой волны

$$\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}| \approx 3.413a_3.$$

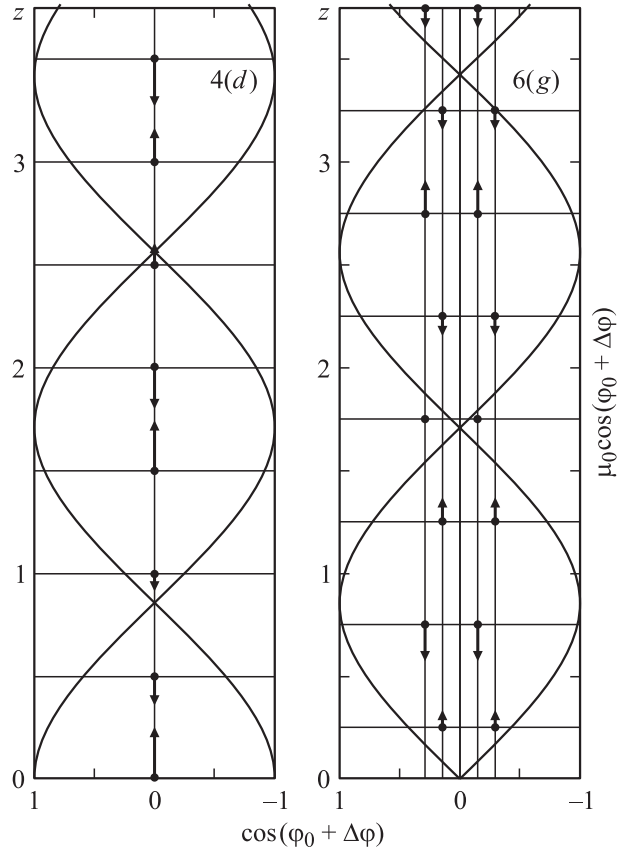


Рис. 3. Модель магнитной структуры  $Er_5Gt_3$  при 4.2 K. Подробности см. в тексте.

На рис. 3 представлена предлагаемая нами модель магнитной структуры в пределах четырех элементарных кристаллических ячеек, расположенных последовательно друг за другом вдоль оси  $\mathbf{a}_3$ , на длине периода продольной спиновой волны. Атомы, занимающие  $4(d)$ -позиции, внутри ряда элементарных кристаллических ячеек, расположенных вдоль оси  $\mathbf{a}_3$  кристалла, образуют две эквивалентных цепочки с координатами  $(x_1 = 1/3, y_1 = 2/3)$  и  $(x_2 = 2/3, y_2 = 1/3)$  (на рисунке приведена одна из них), в которых расстояние между ближайшими атомами вдоль оси  $\mathbf{a}_3$  равно  $a_3/2$ . В  $6(g)$ -позициях образуется шесть эквивалентных цепочек с координатами  $(x, 0), (0, x), (\bar{x}, \bar{x}), (\bar{x}, 0), (0, \bar{x}), (x, x)$ , в которых расстояние между ближайшими атомами равно  $a_3$ . Величина и направление магнитных моментов в позициях обоих типов не зависят от координат  $(x, y)$ , но зависят от координаты  $z$ . Для большей наглядности на рисунке изображены кривые зависимости  $\cos(\varphi_0 + \Delta\varphi)$  от  $z$  для случаев  $\varphi_0 = 0; \pi; -\pi/2$  и  $\pi/2$  ( $\varphi_0$  — исходная фаза,  $\Delta\varphi = 2\pi\mu z$  — фаза, приобретаемая за счет модуляции магнитной структуры). Длина стрелок соответствует величине  $\mu_{a_3} = \mu_0 \cos(\varphi_0 + \Delta\varphi)$  (здесь обозначение  $\mu_{a_3}$  отражает тот факт, что магнитный момент направлен вдоль оси  $\mathbf{a}_3$ ,  $\mu_0(4(d)) \approx (9.54 \pm 0.10)\mu_B$ ,  $\mu_0(6(g)) \approx (6.12 \pm 0.07)\mu_B$  — максимальные величины

магнитных моментов атомов Er в  $4(d)$ - и  $6(g)$ -позициях). Часть каждой из косинусоид, расположенная слева от значения  $\cos(\varphi_0 + \Delta\varphi) = 0$ , соответствует положительному значению проекции магнитного момента атома, расположенного на данной высоте, на ось  $z$ , другая половина — отрицательному значению. Представленные кривые дают возможность наиболее ясно интерпретировать характер зависимости величины и направления магнитного момента каждого атома от его положения в кристаллической решетке. Здесь приведены величины магнитных моментов и погрешности их вычисления, полученные при расчетах, выполненных с использованием программы „Fullprof“ ( $R_m \approx 9.55\%$ ).

Следует отметить, что величина  $\mu_0(4(d)) \approx (9.54 \pm 0.10)\mu_B$  в пределах погрешностей измерений и вычислений совпадает с общеизвестным значением

$$\mu_J = g \sqrt{J(J+1)} \approx 9.58\mu_B,$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = 1.2$$

— множитель Ланде,  $S = 3/2$  — результирующее спиновое квантовое число,  $L = 6$  — результирующее орбитальное квантовое число,  $J = S + L = 15/2$  — полный момент количества движения для катиона  $\text{Er}^{3+}$  (см., например, [15]). Поскольку  $\lambda/a_3 \approx 3.413$  является величиной порядка 1, полученную продольную спиновую волну следует считать короткопериодической.

Исследования зависимости интенсивности отражений  $(111)^+$  при  $2\Theta \approx 44.8^\circ$  и  $(211)^-$  при  $2\Theta \approx 55.02^\circ$  на нейтронограмме  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$  от температуры в интервале от 4.2 до 80 К (вставка на рис. 2) свидетельствует о том, что магнитный вклад в отражения с повышением температуры монотонно уменьшается и окончательно пропадает при  $T \sim 38$  К. Последнее обстоятельство можно связать с разрушением магнитного порядка в соединении при этой температуре. Полученное значение температуры ( $\sim 38$  К) можно отождествить с температурой Нееля изучаемого интерметаллида.

#### 4. Обсуждение результатов

В работе [3] сообщается, что  $\text{Tb}_5\text{Sb}_3$  в интервале температур  $80 \text{ К} \leq T \leq 150 \text{ К}$  имеет магнитную структуру типа конической спирали (оси конусов образуют с осью  $\mathbf{a}_3$  угол, равный  $51.5^\circ$ , угол полураствора конуса равен  $28.5^\circ$ ). Авторы [4] утверждают, что в  $\text{Tb}_5\text{Si}_3$  при 4.2 К атомы Tb в  $4(d)$ -позиции образуют простую спираль, а в  $6(g)$ -позиции — коническую спираль, в которой ось конуса параллельна оси  $\mathbf{a}_3$ , а угол между магнитным моментом и осью  $\mathbf{a}_3$  равен  $76^\circ$ .

Эти модели магнитных структур невозможно построить из базисных функций неприводимых представлений, полученных в настоящей работе. Поэтому их, по мнению авторов, следует рассматривать как противоречащие результатам симметричного анализа. В связи с изложенным выше требуется их проверка и дальнейшее уточнение.

Попытки усовершенствовать предложенную в настоящей работе модель магнитной структуры  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$  (путем добавления базисных функций других неприводимых представлений к уже использованным) к положительному результату не привели. Сама модель AFLSW является достаточно естественной и простой и не нуждается на данном этапе исследований, по мнению авторов, в каком-либо улучшении. Кроме того, ранее при исследовании эффектов кристаллического поля было показано, что компоненты этого поля более высокого порядка должны благоприятствовать ориентации моментов атомов Er параллельно оси  $\mathbf{a}_3$  (см., например, [16]). Этот результат можно рассматривать как дополнительный довод, подтверждающий справедливость наших выводов о магнитной структуре  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$ , изложенных в настоящей работе.

В дальнейшем авторы планируют опубликовать результаты нейтронографического исследования магнитной структуры  $\text{Er}_5\text{Si}_3$  при  $T = 20$  К (в этом интерметаллиде при указанной температуре нами также обнаружена антиферромагнитная продольная спиновая волна AFLSW).

Авторы благодарят В.К. Найша, С.Б. Петрова, Ю.Н. Скрыбина за полезные советы и участие в обсуждении полученных результатов, В.И. Бобровского и В.А. Казанцева за помощь в оформлении работы.

#### Список литературы

- [1] P. Schobinger-Paramantellos. J. Magn. Magn. Mater. **28**, 1–2, 97 (1982).
- [2] P. Schobinger-Paramantellos, K.H.J. Buschow. J. Magn. Magn. Mater. **49**, 3, 349 (1985).
- [3] J.K. Yakinthos, I.P. Semitelou, E. Roudaut. Solid State Commun. **59**, 4, 227 (1986).
- [4] I.P. Semitelou, Hel. Konguetsof, J.K. Yakinthos, E. Roudaut. J. Magn. Magn. Mater. **79**, 1, 131 (1989).
- [5] I.P. Semitelou, Hel. Konguetsof, J.K. Yakinthos. J. Magn. Magn. Mater. **82**, 2–3, 223 (1989).
- [6] I.P. Semitelou, P. Kotsanidis, J.K. Yakinthos, E. Roudaut. J. Magn. Magn. Mater. **116**, 1–2, 103 (1992).
- [7] I.P. Semitelou, J.K. Yakinthos, E. Roudaut. J. Magn. Magn. Mater. **128**, 1–2, 79 (1993).
- [8] I.P. Semitelou, J.K. Yakinthos, E. Roudaut. J. Phys. Chem. Solids **56**, 7, 891 (1995).
- [9] I.P. Semitelou, J.K. Yakinthos. J. Magn. Magn. Mater. **186**, 1–2, 107 (1998).
- [10] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986). 368 с.

- [11] Ю.А. Изюмов, В.Е. Найш, Р.П. Озеров. Нейтронография магнетиков. Атомиздат, М. (1981). 312 с. [Yu.A. Izyumov, V.E. Naish, R.P. Ozerov. Neutron diffraction of magnetic materials. Consultants Bureau, N.Y.–London (1991). 340 p.].
- [12] International Tables for X-ray Crystallography. Vol. I. Kynoch Press, Birmingham (1952). 558 p.
- [13] Ю.А. Изюмов, Р.П. Озеров. Магнитная нейтронография. Наука, М. (1966). 532 с. [Yu.A. Izyumov, R.P. Ozerov. Magnetic neutron diffraction. Plenum Press, N.Y. (1979). 598 p.].
- [14] Ю.А. Изюмов. Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах. Энергоатомиздат, М. (1987). 200 с.
- [15] С.В. Вонсовский. Магнетизм. Наука, М. (1971). 1032 с. [S.V. Vonsovskii. Magnetism. Vol. 1, 2. John Wiley, N.Y.–Toronto–Jerusalem–London (1974). 1270 p.].
- [16] К. Тейлор, М. Дарби. Физика редкоземельных соединений. Мир, М. (1974). 376 с. [K.N.R. Teylor, M.I. Darby. Physics of rare earth solids. Chapman and Hall Ltd, London (1972)].