Внай К. Агарвал, Р. Н. Кузьмин, Эффективные поля на ядрах Fe^{57} в редкоземельных ферримагнетиках,
Докл. АН СССР, 1973, том 209, номер 2, 328–329

https://www.mathnet.ru/dan37530

Доклады Академии наук СССР
1973. Том 209, № 2

УДК 538.221

ФИЗИКА

ВИНАЙ К. АГАРВАЛ (ИНДИЯ), Р. Н. КУЗЬМИН

ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОЛЯ НА ЯДРАХ Fe^{57} В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 26 VI 1972)

Новые высококоэрцитивные материалы для постоянных магнитов R_2M_{17}, где R — редкоземельный металл (р.з.м.), а M=CO, Fe имеют наибольшую магнитную энергию $(BH)_{max}$ ([1]) и представляют интерес не только для практических целей, но и для теории магнетизма, поскольку в таких соединениях в совершенно неожиданной форме могут проявляться взаимодействия недостроенных $4f$-оболочек р.з.м. с $3d$-элементами.

В сплавах R_2M_{17} интенсивно изучаются эффективные поля на ядрах ([2-7]), однако из-за сложной сверхтонкой структуры (с.т.с.) мёссбауэровских спектров большинству исследователей не удалось получить каких-либо определенных сведений об эффективных полях $H_{эф}$ на ядрах Fe^{57}. Широкий класс исследованных нами ферримагнетиков R_2Fe_{17} (табл. 1)

Таблица 1

Эффективные поля $H_{эф}$ (кэ) на ядрах Fe^{57}

Положения атомов Fe	эксп.	расч.	эксп.	расч.	эксп.	расч.
	Pr_2Fe_{17} *		Nd_2Fe_{17} *		Gd_2Fe_{17} *	
6 (*c*)	336±8	345	332±8	345	359±8	350
18 (*f*)	285	306	282	307	297	313
9 (*d*)	280	298	278	298	295	304
18 (*h*)	265	272	267	272	283	281
	Y_2Fe_{17} **		Dy_2Fe_{17} **		Er_2Fe_{17} **	
4 (*f*)	348	348	363	356	366	356
12 (*j*)	304	305	317	319	318	319
6 (*g*)	292	296	302	310	304	305
12 (*k*)	273	268	292	288	292	287

* Соединения, структурный тип и пространственная группа которых Th_2Zn_{17}, $R\bar{3}m$, (D^5_{3d}).

** Th_2Ni_{17}, $P6_3/mmc$, (D^4_{6h}).

имеет структуры двух родственных типов: Th_2Zn_{17} ([8]) и Th_2Ni_{17} ([9]), в которых атомы железа находятся в четырех кристаллографически неэквивалентных положениях. В структуре типа Th_2Zn_{17} атомы железа занимают положения: $6(c)$, $9(d)$, $18(f)$ и $18(h)$, а в структуре типа Th_2Ni_{17} — $4(f)$, $6(g)$, $12(j)$, $12(k)$.

Определенные нами значения $H_{эф}$ на ядрах Fe^{57} приведены в табл. 1 и соответствуют четырем позициям атомов железа в решетке кристаллов. Приблизительное равенство $H_{эф}$ показывает, что обменное взаимодействие R — Fe намного слабее по сравнению с взаимодействием между атомами Fe — Fe. Так как в данных соединениях атомов железа почти в 9 раз больше, чем редкоземельных элементов, то можно предположить, что основной вклад в $H_{эф}$ дают атомы железа.

Рассматривая конфигурацию окружения каждого атома в структуре соединений типа Th_2Zn_{17} и Th_2Ni_{17}, можно отметить, что атомы железа, находящиеся в положениях: (c), (f), (d), (h) и (f), (j), (g), (k), соответственно имеют одинаковые координационные числа: 13, 11, 10 и 9 по ближайшим атомам железа, а с учетом ближайших редкоземельных ионов: 14, 13, 12, 12. Такие большие координационные числа свойственны структурам с плотной упаковкой, поэтому, полагая, что основной вклад в $H_{эф}$ на ядрах Fe^{57} определяется ближайшими соседями, можно считать соединения R_2F_{17} аналогами твердых растворов редкоземельных металлов в железе. Тогда, на основе рассмотрения модели теории молекулярного поля ближайших соседей и использования величины магнитных моментов ионов, предлагается следующее эмпирическое выражение для расчета $H_{эф}$ на ядрах Fe^{57} для температуры $T = 0°$ K:

$$H_j = K_1\mu_{Fe} \sum_i \left(\frac{n_i^{Fe}}{r_i^{Fe-Fe}} \right)_j + K_2\mu_R \sum_i \left(\frac{n_i^R}{r_i^{Fe-R}} \right)_j, \tag{1}$$

где n_i — число связей сорта i в положении j, i — порядковый номер межатомного расстояния $r_{ij}^{(Fe-Fe;\ Fe-R)}$ в структурном положении j, j — положение атомов в ячейке (c), (f), (d) и (h) для структуры типа Th_2Zn_{17} и (f), (j), (g) и (k) для структуры типа Th_2Ni_{17}; K_1 и K_2 — константы, характерные для данных структурных типов; μ_{Fe} и μ_R — магнитные моменты атома железа и ионов редкоземельных элементов соответственно.

Константа K_1 была определена с помощью экспериментальных значений $H_{эф}$ для соединения Y_2Fe_{17}, в котором иттрий является немагнитным элементом, а потому второй член в выражении (1) равен нулю. Константа K_2 определена с учетом константы K_1 и экспериментальных значений $H_{эф}$ для других соединений.

Из табл. 1 следует, что рассчитанные $H_{эф}$ совпадают с экспериментальными $H_{эф}$ только в предположении знака плюс у второго члена в выражении (1). Эти результаты позволяют считать, что величина магнитных полей на ядрах Fe^{57} в основном определяется поляризацией s-электронов внутренних оболочек атомов железа за счет собственного магнитного момента, а дополнительный вклад в поле $H_{эф}$ создается ионами редкоземельных элементов через поляризованные электроны проводимости, что находится в соответствии с механизмом возникновения полей $H_{эф}$, предложенного Фрименом и Ватсоном ([10], [11]).

Настоящий подход к описанию полей на ядрах может быть распространен и на другие железосодержащие соединения.

Примечание при корректуре. После сдачи статьи в печать появилась работа А. З. Меньшикова и Е. Е. Юрчикова ([12]), в которой приведена формула (7), аналогичная нашей формуле (1), что отвечает одинаковому предположению о пропорциональности эффективного поля на ядре эффективному молекулярному полю, возникающему от ближайшего окружения магнитных атомов.

Университет Рурки
Индия

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
5 IV 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] R. Lemaire, R. Pauthenet, J. Schweizer, IEEE, Trans. Magnetics, Mag., 6, 153 (1970). [2] S. Blow, J. Phys. Ser. C, **3**, 158 (1970). [3] L. M. Levingson, E. Rosenberg et al., J. Appl. Phys., **41**, 910 (1970). [4] K. H. J. Buschow, J. S. Van Wieringen, Phys. Stat. Sol., **42**, 231 (1970). [5] В. К. Агарвал, Р. Н. Кузьмин, Кристаллография, **16**, 774 (1971). [6] J. Bara, O. I. Bodak et al., Proc. of the Conf. on Mössbauer Spectrometry (Dresden), **2**, 1971, p. 377. [7] В. К. Агарвал, Р. Н. Кузьмин, В. И. Чечерников, ibid., p. 681. [8] Е. С. Макаров, С. И. Виноградов, Кристаллография, **1**, 634 (1956). [9] J. W. Florio, N. C. Baenzinger, R. E. Rundle, Acta crystallogr., **9**, 367 (1956). [10] R. E. Watson, A. J. Freeman, Phys. Rev., **123**, 2027 (1961). [11] A. J. Freemen, Hyperfine Structure and Nuclear Radiations, Amsterdam, 1968, p. 427. [12] А. З. Меньшиков, Е. Е. Юрчиков, ЖЭТФ, **63**, 1 (7), 190 (1972).