

СВЕРХТОНКИЕ ПОЛЯ НА ЯДРАХ ^{59}Co В ГЦК СПЛАВАХ $\text{Co}-\text{Fe}-\text{Ni}$. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ УЧЕТ ВНУТРИЗОННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ

С. В. Капельницкий, В. С. Покатилов, В. В. Голикова

Внутризонная корреляция (ВЗК) — многочастичный эффект, обусловленный виртуальными электрон-дырочными переходами внутри каждой $3d$ -подзоны со спинами «вверх» и «вниз». Для Co , Fe , Ni вклад ВЗК в сверхтонкое поле $H_{\text{кор}}$ оценивался в [1] как разность между экспериментальным значением СТП и рассчитанным методом Хартри—Фока, в котором вклад ВЗК исключается. Оценка дала, что для ГПУ Co этот вклад велик и составляет $H_{\text{кор}} = +200$ кЭ, т. е. он того же порядка, что экспериментальное значение СТП $H(\text{Co}) = -223$ кЭ. Однако в настоящее время отсутствуют теоретические расчеты и феноменологические модели, учитывающие этот корреляционный вклад в сверхтонкое поле на ядрах $3d$ -ферромагнетиков и сплавов на их основе.

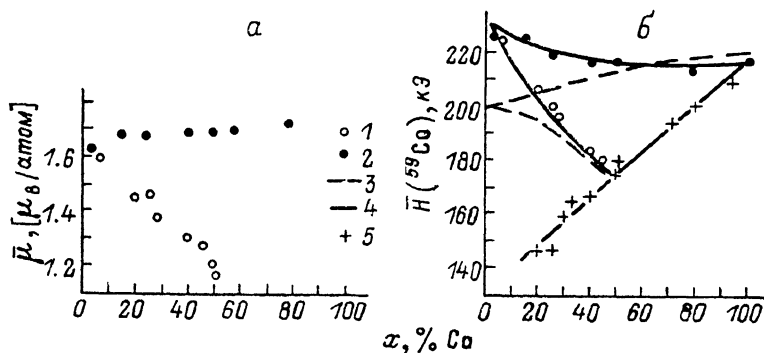


Рис. 1. Средний магнитный момент $\bar{\mu}$ (а) и среднее сверхтонкое поле на ядрах ^{59}Co $\bar{H}(\text{Co})$ (б) в сплавах $\text{Co}_x(\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5})_{100-x}$ (1) и $\text{Co}_x\text{Fe}_{50-x}\text{Ni}_{50}$ (2).

3 — расчет по (1), 4 — по (5), 5 — $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$ [2].

В работе приводятся экспериментальные данные по сверхтонким полям на ^{59}Co в сплавах $\text{Co}_x(\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5})_{100-x}$, где $x=2.8\div 79.3$ %, и $\text{Co}_x\text{Fe}_{50-x}\text{Ni}_{50}$, где $x=4.5\div 50$ %, и предлагается новая феноменологическая модель сверхтонкого поля (СТП), учитывающая вклад внутризонной корреляции.

Распределения СТП измерены методом импульсного ЯМР при 4.2 К. Средние магнитные моменты сплавов $\bar{\mu}$ (рис. 1, а) измерены на вибрационном магнетометре при $T=77$ К с точностью 0.7 %. Образцы в виде фольг толщиной 20 мкм были закалены от 1000 °С.

Концентрационная зависимость среднего СТП \bar{H} приведена на рис. 1, б. Показаны экспериментальные точки и результаты расчета по соотношению

$$\bar{H}(\text{Co}) = a\bar{\mu}_{\text{Co}} + b\bar{\mu}, \quad (1)$$

применяемому для неупорядоченных сплавов [2]. В формулу (1) подставлялся магнитный момент атома кобальта $\bar{\mu}_{\text{Co}}$ по данным нейтронографии [3]; $a = -40$ кЭ/ μ_B , $b = -88$ кЭ/ μ_B , как для сплавов $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$ [2]. Феноменологическое соотношение (1) обычно используется для определения магнитного момента атома по сверхтонким полям.

На рис. 2 приводятся $\bar{\mu}_{\text{Co}}$, рассчитанные по формуле (1) из измеренных $H(\text{Co})$ и $\bar{\mu}$. Видно, что модель (1) неудовлетворительно описывает концентрационную зависимость $\bar{\mu}_{\text{Co}}$ при любом выборе коэффициентов a и b .

В предлагаемой модели среднее сверхтонкое поле $H(A)$ на ядре $3d$ -атома A и вклад $H_{\text{кор}}$, связанный с внутризонной корреляцией, представляется в виде

$$H(A) = H_{\text{соб}} + H_{\Sigma} + H_{\text{кор}}, \quad (2)$$

$$H_{\text{кор}} = Kn_{A\downarrow}(N_{\downarrow} - n_{\downarrow}) - Kn_{A\uparrow}(N_{\uparrow} - n_{\uparrow}), \quad (3)$$

где $H_{\text{соб}}$, H_{Σ} — вклад от собственного магнитного момента атома A и наведенный вклад от магнитного момента ближайших атомов без ВЗК; K — константа; $n_{A\downarrow}$ — число электронов (приходящихся на один атом) в парциальной $3d$ -зоне атома A со спином «вниз»; N_{\downarrow} — число состояний (заполненных + пустых) в $3d$ -зоне со спином «вниз» сплава; n_{\downarrow} — число электронов со спином «вниз» в $3d$ -зоне сплава; аналогичные обозначения для электронов со спином «вверх» (\uparrow).

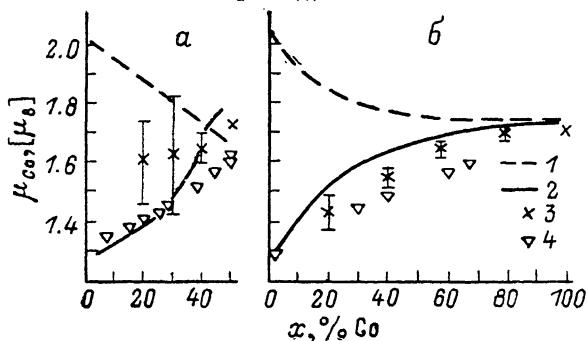


Рис. 2. Средний магнитный момент атома кобальта $\bar{\mu}_{\text{Co}}$ в сплавах $\text{Co}_x\text{Fe}_{50-x}\text{Ni}_{50}$ (а) и $\text{Co}_x(\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5})_{100-x}$ (б).

1 — расчет по (1), 2 — по (5), 3 — нейтронография [3], 4 — расчет методом когерентного потенциала [4].

Выбор $H_{\text{кор}}$ в форме (3) основывается на предположении, что $H_{\text{кор}} = H_{\text{кор}\downarrow} - H_{\text{кор}\uparrow}$ и $H_{\text{кор}} \approx 0$, когда в парциальной $3d\downarrow$ -зоне атома A нет электронов или когда $3d\downarrow$ -зона сплава заполнена (аналогично для зоны со спином «вверх»).

В изучаемых сплавах и сплавах $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$ парциальная $3d$ -зона Co со спином «вверх» и $3d$ -зона со спином «вверх» сплава заполнены [4], поэтому, представляя $H_{\text{соб}} + H_{\Sigma}$ в виде (1), получим из (2), (3)

$$H(\text{Co}) = A\bar{\mu}_{\text{Co}} + B\bar{\mu} + C\bar{\mu}_{\text{Co}}\bar{\mu}. \quad (4)$$

Для исследованных нами сплавов, а также сплавов $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$ [2] коэффициенты в (4) получены методом наименьших квадратов (МНК), $\bar{\mu}_{\text{Co}}$ — из нейтронографических измерений [3]. В окончательном виде имеем

$$H(\text{Co}) = -50.6\bar{\mu}_{\text{Co}} - 170\bar{\mu} + 55.4\bar{\mu}_{\text{Co}}\bar{\mu} \text{ кЭ}. \quad (5)$$

Полученное соотношение хорошо описывает СТП на ядрах ^{59}Co (рис. 1, б), а также $\bar{\mu}_{\text{Co}}$ (рис. 2) для исследованных нами сплавов CoFeNi и сплавов $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$. Отметим, что при $\bar{\mu}_{\text{Co}} = \text{const}$ соотношение (5) совпадает с (1), которым описываются СТП на Co и Ni в $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$ [2].

Из (3) можно также получить оценки параметров зонной структуры. Интересно сравнить их с точными теоретическими расчетами.

Для ^{57}Fe в ОЦК Fe $H_{\text{кор}} \approx 0$ [1]. Поэтому из (3), учитывая, что $N_{\downarrow} = 5.5$, $N_{\uparrow} = 5$ [5], $\mu_{\text{Fe}} = 2.2 \mu_B$, получим $n_{\uparrow}/n_{\downarrow} = 2.15$; зонный расчет [5] дает $n_{\uparrow}/n_{\downarrow} = 1.9$, а кластерный метод [6] $n_{\uparrow}/n_{\downarrow} = 2.0$.

Для ^{59}Co в ГПУ Co $H_{\text{кор}} = +200 \text{ кЭ}$ [1]. Так как $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 5$, $\mu_{\text{Co}} = 1.72 \mu_B$, из (3), (4) следует $C = +36 \text{ кЭ}/\mu_B^2$, что близко к аналогичной ве-

личине из (5) и согласуется с тем, что магнитные моменты и сверхтонкие поля для ГПУ и ГЦК Co близки.

Для H (Fe) в ГЦК Fe_xNi_{100-x} при $x=10-60$ % оценка коэффициентов регрессии (4) по МНК дает

$$H(\text{Fe}) = -78.6\mu_{\text{Fe}} - 1.53\mu - 27.9\mu_{\text{Fe}} \text{ кЭ} \quad (6)$$

(экспериментальные данные из работы [7]). Изменение знака коэффициента C при $\mu_{\text{Fe}}\mu$ по сравнению с выражением (5) для H (Co) в $FeCoNi$ объясняется тем, что, согласно расчетам, выполненным методом когерентного потенциала, при $x < 60$ % в Fe_xNi_{100-x} в отличие от ГЦК $FeCoNi$ изменяется заполнение зоны со спином «вверх» сплава и парциальной зоны железа [8]. Действительно, рассматривая два предельных случая, из (2), (3) получим

$$\frac{\partial^2 H(A)}{\partial \mu \partial \mu_A} = -K \quad \text{при } n_{A\uparrow} = \text{const}, \quad n_{\uparrow} = \text{const},$$

$$\frac{\partial^2 H(A)}{\partial \mu \partial \mu_A} = +K \quad \text{при } n_{A\downarrow} = \text{const}, \quad n_{\downarrow} = \text{const}.$$

Таким образом, предлагаемая количественная модель подтверждает гипотезу о существенном вкладе внутризонной корреляции в сверхтонкое поле на ядрах магнитных $3d$ -атомов и хорошо согласуется с экспериментом, а также со спецификой заполнения состояний со спином «вверх» и «вниз».

Список литературы

- [1] Singal C. M., Krawchuk B., Das T. P. // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. N 11. P. 5108—5116; Das T. P. // Hyperfine Interaction. 1985. V. 24—26. N 1—4. P. 1091—1097.
- [2] Riedi P. C., Scurlock R. G. // Proc. Phys. Soc. 1967. V. 92. N 1. P. 117—124.
- [3] Shibuya N., Nakai Y., Yamasaki K., Kunitomi N. // J. Phys. Soc. Jap. 1979. V. 46. N 2. P. 475—480.
- [4] Jo T., Hasegawa H., Kanamori J. // J. Phys. Soc. Jap. 1973. V. 35. N 1. P. 57—62.
- [5] Moruzzi V. L., Janak J. F., Williams A. R. // Calculated electronic properties of metals. N. Y., 1978. 188 p.
- [6] Salahub D. R., Messmer R. P. // Surf. Sci. 1981. V. 106. N 1—3. P. 415—421.
- [7] Меньшиков А. З., Юрчигов Е. Е. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. № 1. С. 190—197. Collins M. F. // Proc. Phys. Soc. 1965. V. 86. N 553. P. 973—976.
- [8] Hasegawa H., Kanamori J. // J. Phys. Soc. Jap. 1972. V. 33. N 6. P. 1599—1606.

ЦНИИчермет
Москва

Поступило в Редакцию
4 ноября 1988 г.

УДК 548.31 : 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 4, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 4, 1989

СПЕКТРЫ ЯМР

В ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СИСТЕМЕ Rb_2NaHoF_6 В УСЛОВИЯХ КВАДРУПОЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ

Ю. Ю. Костецкий

В соединениях гольмия со структурной формулой эльпасолита A_2VHoX_6 ($A, V=Rb, Cs, Na, K; X=F, Cl$) ион Ho^{3+} имеет немагнитное вырожденное (дублет Γ_3) основное состояние. Это, с одной стороны, дает возможность изучать ЯМР ^{165}Ho , причем поле на ядрах усиливается за счет сверхтонкого взаимодействия (на 2 порядка). С другой стороны, особенности, связанные с тем, что Γ_3 -система является ян-теллеровской [1, 2], приводят к квадрупольному упорядочению при низких температурах в $Cs_2NaHoCl_6$ [3] и Cs_2NaHoF_6 [4].