# Эффекты искажения магнитной структуры вблизи $\mu^+$ -мезона в $\mu$ SR-спектроскопии

© Ю.П. Ирхин, В.Ю. Ирхин

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

#### (Поступила в Редакцию 27 января 1998 г.)

Рассмотрены возможные эффекты сильной локальной анизотропии вблизи µ-мезона, находящегося в междоузлиях редкоземельного металла. Проведено вычисление искажения магнитной структуры и соответствующего вклада в дипольное поле на мюоне. Для случая когда направление на мюон перпендикулярно направлению магнитного момента одного из ионов, предсказан эффект порогового изменения дипольного поля в зависимости от локальной анизотропии или внешнего магнитного поля. Показана возможность существования двух значений дипольного поля для ферромагнитных фаз Dy и Tb и его резкого изменения в зависимости от направления магнитного момента плоскости для спиральных антиферромагнитных структур.

Методика µSR-спектроскопии дает важную информацию о магнитных свойствах вещества и существенно дополняет более традиционные методы. В частности, она позволяет получить данные о величине внутренних магнитных полей в междоузлиях кристаллической решетки. Основными составляющими таких полей являются классическое дипольное и квантовое сверхтонкое поля. Вычисление дипольного поля *B*<sub>dip</sub> на первый взгляд не представляет принципиальных трудностей. В то же время для сверхтонкого поля  $B_{\rm hf}$  необходима детальная информация об электронной структуре кристалла, которая для многих магнитных металлов в настоящее время недостаточна. В таких условиях наиболее естественным является вычисление B<sub>dip</sub> с последующим определением  $B_{\rm hf}$  из экспериментального полного поля на  $\mu^+$ -мезоне  $B_{\mu}$ 

$$B_{\rm hf} = B_{\mu} - B_{\rm dip} - B_{\rm L} - B_{\rm d}, \qquad (1)$$

где поле лоренца  $B_{\rm L} = (4/3)\pi M_s (M_s -$  намагниченность насыщения) и размагничивающее поле  $B_{\rm d}$  также легко находятся обычным образом. Величина  $B_{\rm hf}$ , полученная из (1), может быть затем использована для сравнения с микроскопическими расчетами, имеющими сложный и недостаточно надежный характер. Так, теоретические вычисления  $B_{\rm hf}$  [1–5] не дают хорошего согласия с экспериментом как для 3d-, так и для 4f-магнетиков. По нашему мнению, прежде чем переходить к улучшению теории, следует определить экспериментальные значения  $B_{\rm hf}$  по (1) с учетом реальной величины  $B_{\rm dip}$ .

Разумеется, формула (1) имеет полуфеноменологический характер. Как обсуждается в [4], ситуация может измениться и стать более сложной при корректном учете доменной структуры. Однако далее мы ограничимся рассмотрением одного домена и вычислением вкладов, не зависящих от доменной структуры.

При вычислении различных вкладов в  $B_{dip}$  (1) должны учитываться эффекты, связанные с локальным влиянием мюона на окружающую его решетку. До сих пор обсуждались геометрическое искажение решетки вблизи мюона, изменение плотности заряда и некоторые другие факторы, имеющие электростатический характер [6]. С другой стороны, довольно очевидно, что важную роль может играть искажение магнитной структуры кристалла мюоном. Конечно, ввиду малости магнитного момента мюона его непосредственное магнитное взаимодействие с ионами матрицы невелико. Однако имеется другой очень важный механизм, связанный с появлением большой локальной магнитной анизотропии вблизи мюона. Проще всего этот механизм описать, вводя локальные константы магнитной анизотропии. Величина и свойства симметрии последних могут быть исследованы в рамках теории кристаллического поля. Близкий эффект изменения ориентации магнитных моментов ионов ближайшего окружения под действием градиента электрического поля мюона качественно рассматривался в работе Кембелла [7].

Указанный эффект может играть доминирующую роль для сильно анизотропных редкоземельных (P3) магнетиков, в которых большие орбитальные моменты P3-ионов L ориентируются в электрическом поле мюона, ориентируя тем самым жестко связанные с L полные моменты J = S + L и соответствующие магнитные моменты M = gJ (g - фактор Ланде).

Возмущение магнитной структуры мюоном может иметь место и в *d*-магнетиках, однако его величина должна быть гораздо меньше в силу замораживания орбитальных моментов и слабости магнитной анизотропии. Тем не менее в некоторых случаях и в 3*d*-магнетиках наблюдаются аномалии в  $B_{\mu}$ , возможно связанные с искажением магнитной структуры вблизи мюона. К таковым относятся, например, отклонения кривой  $B_{\mu}(T)$ от пропорциональности  $M_s(T)$  в соединениях GdCo<sub>2</sub>, YFe<sub>2</sub> [8], в которых Gd и Y не имеют локализованных орбитальных моментов (отметим, что отклонения от пропорциональности намагниченности имеются и в парамагнитном Ni для мюонов  $\mu^{-}$  [9]).

В настоящей работе мы рассмотрим искажение магнитной структуры вблизи мюона только для случая РЗ-металлов, где ожидаемая величина эффекта велика и он может быть рассмотрен достаточно простым образом. Как показано, учет такого искажения действительно

1299

может сильно изменить величину дипольного вклада в полное поле на мюоне и, следовательно, дать значительное изменение величины  $B_{\rm hf}$ .

# Энергия кристаллического поля в ГПУ-решетке с учетом вклада мюона

Энергию РЗ-иона вблизи междоузлия, где остановился мюон, естественно записать в виде

$$E = E_{\rm ex} + E_a + E'_a,\tag{2}$$

где обменная энергия имеет вид

$$E_{\rm ex} = -\lambda \cos\theta \tag{3a}$$

для случая легкой оси и

$$E_{\rm ex} = -\lambda \sin \theta \cos(\varphi - \nu) \tag{3b}$$

для случая легкой плоскости (ось *z* параллельна оси *c* ГПУ-кристалла), причем полярный и азимутальный углы  $\theta$  и  $\varphi$  вектора магнитного момента иона отсчитываются от осей *z* и *x*,  $\lambda > 0$  — энергия молекулярного поля, угол  $\nu$  задает его направление в легкой плоскости. В частности,  $\nu = 0$  и  $\pi/6$  для ферромагнитных фаз Dy и Tb соответственно, а для спиральных антиферромагнитных фаз угол  $\nu$  меняется от плоскости к плоскости (анизотропия шестого порядка в базисной плоскости учитывается косвенно через направление молекулярного поля).

Энергия одноосной анизотропии в поле ионов матрицы  $E_a$  и в поле мюона  $E'_a$  имеют вид

$$E_a = K_1 \sin^2 \theta, \qquad E'_a = K' \sin^2 \theta',$$
 (4)

где угол  $\theta'$  отсчитывается от направления на мюон *n*. Последний угол может быть связан с системой координат кристалла формулой [10]

$$\cos\theta' = \mathbf{n}\mathbf{m} = \cos\theta\cos\beta - \sin\theta\sin\beta\cos(\varphi - \alpha), \quad (5)$$

где **m** — единичный вектор в направлении магнитного момента иона,  $\beta$  и  $\alpha$  — полярный и азимутальный углы вектора **n**.

Равновесные значения углов  $\theta$  и  $\varphi$  могут быть найдены из условия минимума энергии (2)  $\partial E/\partial \theta = 0$ ,  $\partial E/\partial \varphi = 0$ . Эта система уравнений может быть решена численно при задании значений параметров.

**Таблица 1.** Константы анизотропии, параметры молекулярного поля и ионные магнитные моменты для тяжелых редкоземельных металлов

	Tb	Dy	Но	Er	Tm
$K_1$ , 10 <sup>9</sup> erg/cm <sup>3</sup>	-0.55	-0.50	-0.22	0.2	0.5
$\lambda$ , 10 <sup>9</sup> erg/cm <sup>3</sup>	1.3	1.0	0.8	0.5	0.3
$M$ , $\mu_{\rm B}$	9.3	10.1	10.3	8.3	7.1

Величины  $K_1$  известны экспериментально для большинства тяжелых РЗМ и приведены в табл. 1 (для Тт и Ег приведены оценки в модели кристаллического поля). Коэффициенты молекулярного поля  $\lambda$  могут быть оценены из значений температур магнитного упорядочения  $T_N$  по формуле

$$\lambda = \frac{3}{2} \frac{J}{J+1} \frac{k_{\rm B} N_{\rm A} \rho T_N}{A},$$

где  $N_{\rm A}$  — число Авогадро,  $\rho$  — плотность, A — атомный вес.

Может показаться, что влияние анизотропии K' не слишком велико, если считать, что константы  $K_1$  и K' значительно меньше энергии молекулярного поля  $\lambda \sim 10^8 - 10^9 \, {\rm erg/cm^3}$ . Однако из табл. 1 видно, что величина  $K_1$  сравнима с  $\lambda$ . Далее из микроскопической формулы

$$K_{1} = -7.32 \left( \sqrt{8/3} - (c/a) \right)$$
$$\times r_{f}^{-2} \alpha_{J} J (J - 1/2) e^{2} Z_{\text{eff}} / a^{3}$$
(6)

(см., например, [11],  $r_f^{-2}$  — средний квадрат радиуса *f*-оболочки,  $\alpha_J$  — коэффициент Стивенса) следует, что величина *K'* может быть значительно больше, чем *K*<sub>1</sub>. Действительно, малый множитель  $\sqrt{8/3} - (c/a)$  (примерно 0.03–0.05 для реальных РЗ-кристаллов) появляется при суммировании по 12 ближайшим соседям и обращается в нуль для идеальной ГПУ-решетки (вклад ионов в этой же плоскости и вклад от соседних плоскостей имеют разные знаки). В то же время для константы *K'* в модели точечных зарядов находим

$$K' = \frac{12\sqrt{2}r_f^{-2}\alpha_J J (J - 1/2)e^2 Z_{\text{eff}}}{a^3}.$$
 (7)

Таким образом, она не содержит указанного малого множителя. Конечно, надежные оценки для K' могут быть получены только при детальном рассмотрении электронной структуры. Поэтому далее будем минимизировать энергию (2) для реальных значений  $\lambda$  и  $K_1$  в случае каждого РЗ-металла, а K' будем считать параметром, пробегающим значения в определенном интервале.

## 2. Искажение магнитной структуры и дипольное поле

Согласно экспериментальным данным для Dy [12] и Но [13], мюон располагается в междоузлии октаэдрического типа. На рис. 1 показано положение такого междоузлия в ГПУ-решетке с окружающими его шестью ближайшими РЗ-ионами. Расстояние от иона до междоузлия равно:  $r = a/\sqrt{2}$ ,  $a = 3.6 \cdot 10^{-8}$  cm — параметр решетки. Для ионов нижней плоскости (A, B, C) имеем  $\beta = \gamma = \arccos \sqrt{1/3} = 0.955 = 55^{\circ}$ , а для ионов верхней плоскости  $\beta = \pi - \gamma$ . Углы  $\alpha$  задаются табл. 2. В отсутствие мюона при  $K_1 > 0$  магнитные моменты направлены по легкой оси *c*, а при  $K_1 < 0$  лежат в легкой плоскости *xy*. В антиферромагнитной фазе угол между спинами в соседних плоскостях составляет  $\delta$ .

Дипольное поле на мюоне определяется формулой

$$\mathbf{B}_{\rm dip} = \sum_{i} \left( M/r_i^3 \right) \left[ 3\mathbf{n}_i(\mathbf{m}_i \mathbf{n}_i) - \mathbf{m}_i \right], \tag{8}$$

где M — магнитный момент иона, для ближайших соседей  $M/r_i^3 = M/r^3 = p \cdot 0.56$  kG, где p — величина магнитного момента в магнетонах Бора. Для идеальной ГПУ-решетки дипольное поле ближайших соседей в междоузлии компенсируется как для  $K_1 > 0$ , так и для  $K_1 < 0$ . При этом компенсация имеет место для вкладов ионов каждой плоскости. Поэтому вклад первой координационной сферы в  $B_{\rm dip}$  как в ферро-, так и в антиферрофазе целиком будет определяться искажением магнитной структуры под действием мюона.

Согласно общей теории магнитной анизотропии (см., например, [14]), изменения знака константы K' в ряду P3M, обусловленные изменением строения многоэлектронной f-облочки, должны происходить одновременно с изменением знака  $K_1$ . Поскольку для реальных P3M имеем  $c/a < \sqrt{8/3} = 1.63$ , в модели точечных зарядов  $K_1$  и K' должны иметь противоположные знаки. Однако некоторые авторы предполагают [15,16], что в физически близкой ситуации внедренного атома водорода реализуется случай с отрицательным эффективным зарядом (анионная модель). Кроме того, возможно существенное влияние неоднородного распределения возмущения электронной плотности. Поэтому мы исследуем все комбинации знаков констант анизотропии.

Поскольку энергия (2) инвариантна при замене  $\alpha \to \pi + \alpha$ ,  $\beta \to \pi - \beta$ , направления спинов в каждой паре узлов (*AA'*), (*BB'*), (*CC'*) и соответствующие вклады в дипольное поле совпадают (за исключением случая вырожденных решений), так что при расчетах достаточно ограничиться ионами нижней плоскости *A*, *B*, *C* ( $\beta = \gamma$ ).

Для понимания физической ситуации полезно рассмотреть предельный случай  $|K'| \gg \lambda$ ,  $K_1$ , который, как обсуждалось в разделе 1, является вполне реальным. Этот случай был исследован ранее при рассмотрении



**Рис. 1.** Октаэдрическое междоузлие 0 в ГПУ-решетке, лежащее в вершине тетраэдров *АВС0* и *A'B'C'0*. Атомы *АВС* и *A'B'C'* принадлежат соседним плоскостям ГПУ-решетки на расстоянии c/2.

Таблица 2.	Азимутальный угол вектора напр	завления	на мюон,
находящийся	я в октаэдрическом междоузлии	(рис. 1)	

	Α	В	С	A'	B'	C'
$lpha,^{\circ}$	-30	-150	90	150	30	-90

сверхтонких полей на примесях замещения в магнетиках с высокой анизотропией [17]. В этом пределе для каждого РЗ-иона вблизи мюона возникают локальные легкие оси или плоскости, т.е. спины ориентируются по оси, направленной на  $\mu$ -мезон, в случае K' > 0 (легкая локальная ось (ЛЛО)) и в плоскости, перпендикулярной этому направлению, для K' < 0 (легкая локальная плоскость (ЛЛП)).

Для ЛЛО существует двукратное вырождение, которое снимается молекулярным полем. В случае  $K_1 > 0$  все спины нижней плоскости направлены к мюону, а спины верхней плоскости — в противоположную сторону, так что суммарное дипольное поле ближайших соседей направлено по оси z и равно

$$\Delta B_{\rm dip}^z = 4\sqrt{3} \left( M/r^3 \right) = p \cdot 3.9 \,\mathrm{kG}. \tag{9}$$

В случае  $K_1 < 0$  спины направлены к мюону при  $|\alpha - \nu| < \pi/2$  и в обратном направлении в противоположном случае (выбор из этих двух возможностей определяется минимальностью отклонения угла  $\varphi$ , что обеспечивает минимум обменной энергии). Обсудим вначале случай  $\nu = 0$ . Тогда спин иона *B* направлен к мюону, а спин узла *A* — от него, так что дипольное поле от этой пары ионов направлено по оси *x* 

$$\Delta B_{\rm dip}^{x} = 2\sqrt{2} (M/r^{3}) = p \cdot 1.6 \,\rm kG. \tag{10}$$

Особая ситуация возникает для узлов C, C' ( $\alpha = \pm \pi/2$ ). В этом случае для обоих возможных направлений энергия молекулярного поля одинакова, так что возникает ситуация вырождения (фрустрации); ср. с обсуждением случая примеси замещения [17]. Соответствующие компоненты дипольного поля от иона C равны

 $\Delta B_{\rm dip}^x = 0,$ 

$$\Delta B_{\rm dip}^{\rm y} = \pm 2\sqrt{2/3} (M/r^3) = \pm p \cdot 0.9 \,\rm kG, \qquad (11)$$

$$\Delta B_{\rm dip}^{z} = \pm 2/\sqrt{3} (M/r^{3}) = \pm p \cdot 0.65 \,\rm kG. \tag{12}$$

Они либо компенсируются, либо удваиваются в зависимости от взаимного направления спинов C, C'. Вопрос о корреляции этих спинов требует дальнейших исследований с учетом, например, обменного взаимодействия между спинами C и C'.

При повороте оси молекулярного поля на малый угол (например, для Tb) вырождение снимается, так что при  $\nu < 0$  спин узла *C* направлен к мюону, а при  $\nu > 0$  — от него. В результате для ферромагнитного случая ( $\delta = 0$ ) всегда имеются *y*- и *z*-компоненты поля,



**Рис. 2.** Угол отклонения спина  $\theta$  в зависимости от константы локальной анизотропии K' (в единицах  $\lambda$ ). Штриховые линии — случай "легкая ось" ( $K_1 > 0$ ): верхняя кривая — ЛЛО, нижняя — ЛЛП. Сплошные линии — случай "легкая плоскость" ( $K_1 < 0$ ),  $\nu = 0$ : нижняя линия — ЛЛО (спин A), верхняя — ЛЛП (спин B).

равные удвоенным величинам (11), (12). При  $\nu = \pm \pi/3$  возникает фрустрация уже для узла *А* либо *В* и вся картина поворачивается на 60°.

Для спиральных структур значение поля (наличие *ху*компоненты) зависит от того, находятся ли направления молекулярного поля в двух рассматриваемых плоскостях, которые задаются углами  $\nu$  и  $\nu + \delta$ , в одном и том же или в разных секторах (0,  $\pm \pi/3$ ), ( $\pm \pi/3$ ,  $\pm 2\pi/3$ ),... (напомним, что в реальных спиральных структурах  $|\delta|$ , как правило, существенно меньше  $\pi/3$ ). В первом случае *ху*-компоненты поля от узлов *С* и *С'* удваиваются, а во втором — компенсируются. Итак, возникают два значения дипольного поля, соответствующие двум различным вариантам ориентации магнитного момента в плоскостях, окружающих мюон.

В случае  $K' \to -\infty$ ,  $K_1 > 0$  спины направлены к плоскости, образованной осью *z* и соответствующим вектором **n**, а угол  $\theta$  составляет  $\pi/2 - \gamma$ , причем

$$\Delta B_{\rm dip}^z = 2\sqrt{6} (M/r^3) = p \cdot 2.7 \,\rm kG.$$
 (13)

В случае  $K' \to -\infty$ ,  $K_1 < 0$  асимптотическая ориентация спина в локальной плоскости однозначно не определена и задается соотношением остальных параметров гамильтониана. При  $\lambda \gg |K_1|$  спин направлен по линии, получающейся проектированием направления молекулярного поля на ЛЛП, а при  $\lambda \ll |K_1|$  — по линии пересечения легкой плоскости *ху* и ЛЛП. В этом пределе имеем

$$\Delta \mathbf{B}_{\rm dip} = -\sum_{i} \mathbf{M}_{i} / r^{3}. \tag{14}$$

Для  $\nu = 0$  дипольное поле, как и при  $K_1 > 0$ , направлено по оси *х*. Ситуация вырождения двух решений возникает здесь при  $\nu = \pi/6$  для иона *B* (и для остальных ионов после поворота на соответствующие углы), поскольку для него ЛЛП перпендикулярна направлению молекулярного поля. Таким образом, в случае ЛЛП два поля должны наблюдаться для ферромагнитной фазы Тb. Для спиральных структур также возникают два значения поля в зависимости от ориентации моментов в паре плоскостей, окружающих мюон.

Рассмотрим теперь изменение направления спинов и дипольного поля при возрастании |K'| от нуля для различных типов анизотропии матрицы. Результаты расчетов показаны на рис. 2–8, причем везде K' откладывается в единицах  $\lambda$ ,  $|K_1|$  положено равным  $\lambda/2$  (что примерно соответствует данным табл. 1), а дипольное поле приводится на единичный момент РЗ-иона (в магнетонах Бора).

В случае анизотропии РЗМ типа "легкая ось"  $K_1 > 0$ (Tm, Er) при K' = 0 все спины располагаются вдоль оси c ( $\theta = 0$ ). Для ЛЛО с увеличением K' все спины отклоняются от оси c на одинаковый угол  $\theta$ (рис. 2), причем  $\varphi = \alpha$  (либо  $\varphi = \pi + \alpha$  для верхней плоскости) уже для произвольно малых K' (анизотропию РЗМ в плоскости не учитываем). При  $K' \to +\infty$  угол  $\theta$ стремится к  $\gamma$  как для нижней, так и для верхней плоскости. Для ЛЛП ситуация аналогична с тем отличием,



**Рис. 3.** Зависимость дипольного поля на мюоне  $(kG/\mu_B)$  от анизотропии K' в случае ЛЛО (K' > 0). Штриховая линия —  $\Delta B_{dip}^z$  для  $K_1 > 0$ . Сплошные линии —  $\Delta B_{dip}^x$  для  $K_1 < 0$ : нижняя линия — ферромагнитная фаза с  $\nu = 0$ , верхняя — спираль в случае, когда мюон окружает пара плоскостей с  $\nu = \pm \pi/6$ .



**Рис. 4.** Зависимость дипольного поля на мюоне  $(kG/\mu_B)$  от K' для случая ЛЛП (K' < 0). Штриховая линия —  $\Delta B_{dip}^z$  для  $K_1 > 0$ . Сплошная линия —  $\Delta B_{dip}^z$  для  $K_1 < 0$ .



**Рис. 5.** Зависимость углов  $\theta$  (сплошная линия) и  $\varphi$  (штриховая линия) от константы локальной анизотропии в ситуации фрустрации для иона *C*.

что максимальный угол отклонения равен  $(\pi/2) - \gamma$ , а  $\varphi$  сразу равен  $\pi + \alpha$ . Отметим, что "насыщение" угла  $\theta$  с ростом K' в случае ЛЛП происходит быстрее, чем в случае ЛЛО. Поскольку симметрия в плоскости *ху* сохраняется, дипольное поле при  $K_1 > 0$  всегда направлено по оси *с*. Оно положительно для ЛЛО и отрицательно для ЛЛП (рис. 3, 4).

В случае анизотропии типа "легкая плоскость"  $K_1 < 0$ (Tb, Dy, Ho) при K' = 0 все спины располагаются в направлении молекулярного поля ( $\theta = \pi/2, \varphi = 0$  при  $\nu = 0$ ). Рассмотрим вначале случай ЛЛО. При  $\nu = 0$ отклонения от оси *x* с увеличением K' для узлов *A* и *B* противоположны по направлению. В результате от этой пары спинов возникает дипольное поле в направлении *x*. Для спина *C* возникает обсуждавшаяся выше ситуация фрустрации. При малых конечных K' он не отклоняется, а критическое значение  $K_c$  определяется параметрами  $\lambda$  и  $K_1$  (рис. 5). Этот эффект наиболее просто может быть продемонстрирован на простой двумерной модели с энергией

$$E = -\lambda \cos \varphi + K \sin^2 \varphi, \qquad (15)$$

причем К < 0. Тогда условие экстремума имеет вид

$$\sin\varphi(\lambda + 2K\cos\varphi) = 0. \tag{16}$$

Таким образом, отклонение спина от оси x возникает при  $2|K| > \lambda$ .

Существование порогового значения  $K_c$  может быть обнаружено при изменении значения  $K'/\lambda$  (в частности, при включении внешнего магнитного поля либо изменении температуры; ср. [18]). Для значений K' больше критического с равной вероятностью возможны два направления спина C, которые отличаются заменой  $\theta \to \pi - \theta, \varphi \to -\varphi$ . Зависимости компонент дипольного поля от K' для одного из решений показаны на рис. 6. Асимптотические значения при  $K' \to +\infty$  определяются (11). Зависимость  $\Delta B_{dip}^{z}(K')$  имеет слабо выраженный максимум. Наблюдаемый вклад в дипольное поле зависит от того, одинаковы или противоположны направления спинов C и C'. В первом случае при  $K' > K_c$  возникает заметное дипольное поле в направлении оси CC', а в

противоположном случае вклад этой пары спинов компенсируется за исключением *x*-компоненты. При  $\nu \neq 0$ (в частности, для ферромагнитной фазы Tb, где  $\nu = \pi/6$ ) вырождение снимается, аналогично обсуждавшемуся выше пределу  $K' \to +\infty$ .

Для спиральных структур, вообще говоря, имеется непрерывное распределение дипольного поля в зависимости от направлений намагниченности плоскостей, между которыми попадает мюон. На рис. З наряду с полем  $\Delta B_{dip}^{x}$  при  $\nu = 0$  показана зависимость дипольного поля для случая спиральной конфигурации, когда  $\nu = \pi/6$  для нижней плоскости и  $\nu = -\pi/6$  для верхней плоскости (в этом случае дипольное поле также направлено по оси *x*). Видно, что различие кривых является слабым и обусловлено в основном влиянием порогового поворота спинов *C*, *C'*. В то же время резкие изменения значения дипольного поля возникают (в случае когда  $K' > K_c$ ) при переходе направления момента одной из плоскостей через  $\nu = n\pi/3$ , поскольку в этой точке скачком меняется вклад "фрустрированных" спинов.

Для случая ЛЛП при  $K_1 < 0$ ,  $\nu = 0$  отклонения от оси *x* для спинов *A*, *B* с увеличением |K'| также одинаковы по величине и противоположны по направлению. Для узла *C* имеем  $\theta = \pi/2$ ,  $\varphi = 0$  независимо от *K'*, поскольку это направление лежит в плоскости локальной анизотропии. Таким образом, дипольное поле направлено по оси *x* (рис. 4).



**Рис. 6.** Зависимость компонент дипольного поля  $\Delta B_{dip}^i$  (kG/ $\mu_B$ ) (вклад иона *C*) от константы локальной анизотропии в ситуации фрустрации.



**Рис. 7.** Зависимость углов  $\theta$  (слошная линия) и  $\varphi$  (штриховая линия) от константы локальной анизотропии в ситуации фрустрации для иона B ( $\nu = \pi/6$ ).



**Рис. 8.** Зависимость компонент дипольного поля  $\Delta B_{dip}^{i}$  (kG/ $\mu_{\rm B}$ ) (вклад иона *B*) от константы локальной анизотропии в ситуации фрустрации ( $\nu = \pi/6$ ).

В ситуации фрустрации ( $\nu = \pi/6$ ) зависимость направления спина иона B от K' также оказывается необычной. Вплоть до некоторого критического значения К<sub>с</sub> (как видно из рис. 7, оно существенно больше, чем в случае ЛЛО) угол  $\varphi$  не изменяется, а угол  $\theta$  падает (или растет для другого решения). При  $|K'| > K_c$  угол  $\theta$ перестает изменяться, а угол  $\varphi$  начинает расти (второе решение отличается заменой  $\varphi \rightarrow \pi/3 - \varphi$ ). Поведение компонент дипольного поля с изменением К' показано на рис. 8. Видно, что ярко выраженные особенности при  $|K'| = K_c$  имеются на кривых  $\Delta B^x_{\mathrm{dip}}(K')$  и  $\Delta B^y_{\mathrm{dip}}(K')$ , в то время как особенность в  $\Delta B^{z}_{dip}(K')$  практически незаметна. При переходе направления молекулярного поля пары плоскостей через точки фрустрации  $\nu = \pi/6 + n\pi/3$ в случае  $|K'| > K_c$  имеет место снятие вырождения решений, так что полное поле на мюоне резко меняется.

### 3. Обсуждение результатов

Из представленных расчетов видно, что эффект влияния искажения магнитной структуры на дипольное поле сильно зависит от величины К'. Нахождение последней из экспериментальных данных пока затруднительно (необходимо исследование  $\mu$ SR в сильных внешних полях). Имеются некоторые данные по влиянию водорода на магнитную анизотропию соединений RFe2 [16]. В этой работе были получены значения  $K'_{\rm H} \sim 10^8 \, {\rm erg/cm^3}$ , которые удовлетворительно описывают эксперимент. При этом подгоночным параметром служил эффективный заряд иона водорода  $Z_{\rm H} = -1$ , что соответствует анионному характеру водорода. Последнее вызывает сомнения с точки зрения электростатики. Таким образом, величина К' очень сильно зависит от экранирования заряда мюона (или водорода) электронами проводимости. Последний эффект может быть теоретически рассмотрен в различных моделях, например, с учетом правила сумм Фриделя через фазы рассеяния электрона [19]. Эта модель была использована для вычисления  $B_{\rm hf}$  в Fe, Co и Ni [5] и обсуждения обычной и локальной магнитной анизотропии в РЗ-системах [20].

Качественно новые эффекты (наличие двух сильно различающихся значений дипольного поля и т.д.) возникают при достаточно больших |K'|, однако влияние локальной анизотропии оказывается существенным уже при умеренных значениях этой величины. Как видно из рис. 3, 4, для не слишком больших |K'| поле меняется линейно, а для  $|K'|/\lambda = 2|K_1|/\lambda = 1$  имеем при любых комбинациях знаков  $|\Delta B_{\rm dip}| \cong 1.5 \, {\rm kG}/\mu_{\rm B}$ . Для спиральных фаз Dy и Ho при низких температурах были получены экспериментальные значения  $B_{\mu}^{\rm Dy} = 13.6 \, {\rm kG} \, [12]$  и  $B_{\mu}^{\rm Ho} = 15 \, \rm kG \, [13]$ . Соответствующее значение дипольного поля в отсутствие искажения магнитной структуры, найденное путем суммирования по всем РЗ-ионам решетки [13] (напомним, что при этом вклад ближайших соседей отсутствует), равно  $B_{\rm dip}^0 = 13 \, {\rm kG}.$  Поскольку в антиферромагнитной фазе имеем  $B_{\rm L} = B_{\rm d} = 0$ , отсюда находим  $B_{\rm hf}^{\rm Ho}=2\,{\rm kG},\,B_{\rm hf}^{\rm Dy}=0.6\,{\rm kG}.$  Однако, как следует из приведенной выше оценки, при учете искажения величина дипольного поля существенно меняется. Таким образом, исследованный нами вклад от поворота спинов ближайших соседей может привести к сильному изменению оценки сверхтонкого поля.

Вычисленный нами вклад  $\Delta B_{\rm dip}$  существенно определяется локальными характеристиками, а не средней спонтанной намагниченностью  $M_s(T)$  (в частности,  $\Delta B_{\rm dip}$  может даже иметь совершенно другое направление). Как отмечалось выше, в работе [8] обнаружены сильные отклонения зависимости  $B_{\mu}(T)$  от пропорциональности  $M_s(T)$ . Возможно, они проявляются в точках компенсации (см. рис. 8 для TmFe<sub>2</sub> в [8]), где  $\mu$ SR совершенно не чувствует обращения в нуль величины  $M_s(T)$ , которая определяет вклад от поля Лоренца В<sub>L</sub>. С этим же может быть связано отсутствие заметного скачка  $B_{\mu}$  при антиферро-ферро-переходе в Dy [12]. В этом отношении представляли бы интерес µSR-исследования ориентационных фазовых переходов в соединениях RCo<sub>5</sub> и сравнение полученных данных с магнитными измерениями.

Представляет интерес возможность резкого изменения дипольного поля при изменении внешних параметров (в частности, магнитного поля) вблизи критического значения локальной анизотропии в ситуации фрустрации. Неясно, имеет ли к этому отношение зависимость  $B_{\mu}(H)$  GdCo<sub>2</sub> и YFe<sub>2</sub> [8], которая демонстрирует пороговое значение поля около 0.1 kG. Авторы [8] связывают ее со вкладом  $B_{\rm hf}$ , который определяется в основном *d*-электронами и антипараллелен намагниченности *d*-подрешетки.

Далее экспериментальное исследование  $B_{\rm dip}$  (в частности, поиск его нескольких значений) может дать ценную информацию о спиральных магнитных структурах. Важным здесь является вопрос о локализации мюона и необходимости усреднения дипольного поля по некоторой области. Согласно [12,13], мюон можно считать достаточно хорошо локализованным.

Для детального исследования предсказанных эффектов требуются дальнейшие экспериментальные исследования. Особенно важны измерения в сильных полях, бо́льших локального поля анизотропии.

Авторы благодарят Б.А. Никольского за привлечение внимания к данной тематике и обсуждения.

Работа частично финансирована грантами Российского фонда фундаментальных исследований № 96-02-03271 и 96-02-16999-а.

#### Список литературы

- [1] J. Keller. Hyperfine Interact. 6, 1, 15 (1979).
- [2] M.B. Stearns. Phys. Lett. A47, 5, 397 (1974).
- [3] P.F. Meier. Solid State Commun. 17, 8, 987 (1975).
- [4] В.П. Смилга, Ю.М. Белоусов. Мюонный метод исследования вещества. Наука, Л. (1991).
- [5] P. Jena. Solid State Commun. 19, 1, 45 (1976).
- [6] H. Kronmueller, H.R. Hilzinger, P. Monachesi, A. Seeger. Appl. Phys. 18, 2, 193 (1979); Х. Кронмюллер. В кн.: Водород в металлах. Т. 1. Основные свойства. Мир, М. (1981). С. 344.
- [7] I.A. Campbell. J. Phys. Lett. 45, 1, 127 (1984).
- [8] S. Barth, E. Albert, G. Heiduk, A. Moslang, A. Weidinger, E. Recknagel, K.H.J. Buschow. Phys. Rev. B33, 1, 430 (1986).
- [9] K. Nagamine, S. Nagamiya, O. Hashimoto, S. Kobayashi, T. Yamazaki. Hyperfine Interact. 2, 2, 407 (1976).
- [10] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, Л. (1975).
- [11] Ю.П. Ирхин, Е.И. Заболоцкий, Е.В. Розенфельд, В.П. Карпенко. ФТТ 15, 10, 2963 (1973).
- [12] W. Hofmann, W. Kundig, P.F. Meier, B.D. Patterson, K. Ruegg. Phys. Lett. A65, 4, 343 (1978).
- [13] И.А. Кривошеев, А.А. Неживой, Б.А. Никольский, А.И. Пономарев, В.Н. Дугинов, В.Г. Ольшевский, В.Ю. Помякушин. Письма в ЖЭТФ 65, 1, 77 (1997).
- [14] Ю.П. Ирхин. УФН 154, 2, 321 (1988).
- [15] W.E. Wallace, S.K. Malik, T. Takeshita, S.G. Sankar, D.M. Gualtierti. J. Appl. Phys. 49, Pt. II, 3, 1486 (1978).
- [16] N.V. Mushnikov, V.S. Gaviko, A.V. Korolyov, N.K. Zaikov. J. Alloys Compoun. 218, 2, 165 (1995).
- [17] Ю.П. Ирхин, Е.В. Розенфельд. Изв АН СССР. Сер. физ. 52, 9, 1678 (1988).
- [18] К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, М. (1979).
- [19] E. Daniel. J. de Phys. Rad. 20, 10, 769 (1959).
- [20] V.Yu. Irkhin, Yu.P. Irkhin. Phys. Rev. B57, in press (1998).