

- [1] Певцов А. Б., Пермогоров С. А., Селькин А. В., Сырбу Н. Н., Уманец А. Г. // ФТП. 1982. Т. 16. № 8. С. 1399—1405.
- [2] Сырбу Н. Н., Мамаев В. М. // ФТП. 1983. Т. 17. № 4. С. 694—698.
- [3] Селькин А. В., Стамов И. Г., Сырбу Н. Н., Уманец А. Г. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 35. № 2. С. 51—53.
- [4] Лазарев В. Б., Шевченко В. Я., Маренкин С. Ф. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1979. Т. 15. № 10. С. 1701—1712.
- [5] Hegyi I. J., Loebner E. E., Poor E. W., White J. G. // Phys. Chem. Sol. 1963. V. 23. N 2. P. 333—337.
- [6] Sobotta H., Neuman H., Syrbu N. N., Riede N. // Phys. St. Sol. (b). 1983. V. 112. N 2. P. K555—K558.
- [7] Сырбу Н. Н., Хачатурова С. Б. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 9. С. 2687—2690.
- [8] Горбань И. С., Горыня В. А., Луговой В. И., Маковецкая А. П. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 6. С. 1638—1641.

Кишиневский политехнический институт  
им. С. Лазо  
Кишинев

Поступило в Редакцию  
23 мая 1989 г.  
В окончательной редакции  
25 октября 1989 г.

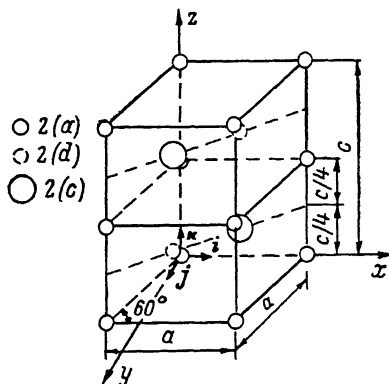
УДК 539.143.43

© Физика твердого тела, том 32, № 4, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 4, 1990

## РАСЧЕТ ДИПОЛЬНЫХ ПОЛЕЙ НА ЯДРАХ $^{55}\text{Mn}$ В $\text{MnSb}$

*И. Г. Кишинтари, А. М. Ахалкаци*

Недавно на основе анализа спектров ЯМР нами была произведена численная оценка вклада различных механизмов в формирование сверхтонкого (СТ) поля на ядрах  $^{55}\text{Mn}$  в ферромагнитном интерметаллическом соединении  $\text{MnSb}$  [1, 2], а также изучены многоквантовые механизмы формирования эха в упомянутой системе [3]. В настоящей публикации приводятся результаты расчета сдвигов СТ полей, связанных с дипольным взаимодействием спинового магнитного момента ядра  $\text{Mn } 2(a)$  с  $3d$ -моментами окружающих атомов. Соответствующие сдвиги  $\Delta H_i^{\text{дип}}$  отличны от нуля только



Элементарная ячейка решетки  $\text{MnSb}$ .

Узлы  $2(d)$  в стехиометрически чистом  $\text{MnSb}$  не заняты атомами. Магнитный момент атомов  $\text{Sb}$  в узлах  $2(c)$  равен нулю [6]. Параметры решетки:  $a=4.130$ ,  $c=5.780 \text{ \AA}$ .

для некубических кристаллов и могут быть представлены в виде [4]

$$\Delta H_i^{\text{дип}} = \lambda_i [1 - 3(\mathbf{MR})^2], \quad (1)$$

где  $\lambda_i = \mu_{\text{Mn}}/r_i^3$ ;  $\mathbf{M}$  — вектор, задающий направление намагниченности в домене;  $\mathbf{R}$  — единичный вектор в направлении ближайших соседей.  $\mu_{\text{Mn}} = 3.55 \mu_B$  — магнитный момент атомов  $\text{Mn } 2(a)$ ;  $r_i$  — расстояние до  $i$ -й магнитной координационной сферы. Поскольку дипольное взаимодействие быстро убывает с расстоянием, можно ограничиться рассмотрением вклада магнитных атомов, расположенных внутри сферы радиусом  $5-6 \text{ \AA}$ , т. е. учесть сдвиги СТ полей от атомов 2, 3 и 6 координационных сфер (см. таблицу в [2]).

Выберем систему взаимно перпендикулярных осей с центром в рассматриваемом атоме и учтем, что ось легкого намагничивания лежит в базисной плоскости:  $\mathbf{M} = \pm \mathbf{i}$  [5]. Выразим единичный вектор через орты  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$ ,  $\mathbf{k}$  для атомов различных координационных сфер (см. рисунок).

К примеру, вторая сфера содержит 2 атома Mn 2 (а), расположенных вдоль оси  $z$  симметрично по отношению к данному, т. е.  $\mathbf{R} = \pm \mathbf{k}$ , поэтому каждый из атомов этой сферы дает дипольный сдвиг  $\Delta H_2^{\text{дип}} = \pm \lambda_2$ , что соответствует СТ полю 0.136 Тл.

В третьей координационной сфере находится 6 атомов, расположение которых относительно начала координат задается в виде  $\pm \mathbf{i}; \pm 1/2 (\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}); \pm 1/2 (\mathbf{i} - \sqrt{3}\mathbf{j})$ . Тогда с помощью (1) можно получить, что из 6 атомов данной сферы четыре дают одинаковые сдвиги  $\Delta H_3^{\text{дип}} = +0.25\lambda_3$ , а оставшиеся два  $-2\lambda_3$ .

Наконец, шестая сфера содержит 12 атомов, единичные векторы в направлении которых имеют вид

$$\begin{aligned} & \pm (\mathbf{i} \cos 35^\circ + \mathbf{k} \cos 55^\circ), \quad \pm (\mathbf{i} \cos 35^\circ - \mathbf{k} \cos 55^\circ), \quad \pm (\mathbf{i} \cos 65^\circ + \mathbf{j} \cos 45^\circ + \mathbf{k} \cos 55^\circ), \\ & \pm (\mathbf{i} \cos 65^\circ - \mathbf{j} \cos 45^\circ + \mathbf{k} \cos 55^\circ), \quad \pm (\mathbf{i} \cos 65^\circ + \mathbf{j} \cos 45^\circ - \mathbf{k} \cos 55^\circ), \\ & \pm (\mathbf{i} \cos 65^\circ - \mathbf{j} \cos 45^\circ - \mathbf{k} \cos 55^\circ). \end{aligned}$$

Как показал анализ, атомы этой сферы могут быть разбиты на две группы эквивалентных атомов, дающих сдвиги  $\Delta H_6^{\text{дип}} = -\lambda_6$  и  $+0.5\lambda_6$  соответственно. Результаты расчета сдвигов полей, связанных с дипольным взаимодействием, приведены в таблице.

Координационные сферы, расстояния  $r_i$   
и сдвиги дипольных полей  $\Delta H_i^{\text{дип}}$  в стехиометрическом MnSb.  
Результирующее СТ поле на ядрах  $^{55}\text{Mn}$  без учета  
квадрупольного расщепления составляет  $-24.2$  Тл [1]

Номер сферы $i$	Расстояние до $i$ -й сферы $r_i$ , Å	Общее число атомов	Число эквивалентных атомов	Сдвиги дипольных полей $\Delta H_i^{\text{дип}}$ , Тл
2	2.890	2	2	+0.136
3	4.130	6	2	-0.093
6	5.041	12	4	+0.012
			8	-0.026
				+0.013

Спектр ЯМР  $^{55}\text{Mn}$  стехиометрически чистого MnSb представляет собой резонансную линию в диапазоне частот 250—260 МГц, расщепленную за счет квадрупольного взаимодействия на пять спектральных компонент с шириной  $\approx 1.6$  МГц и расстоянием между их центрами порядка 2.0 МГц (см. рис. «а» в [1]). При наблюдении резонанса в доменных границах ферромагнетика из-за вращения вектора локальной намагниченности разброс дипольных полей приводит к уширению или расщеплению неоднородно-уширенных линий ЯМР, причем влияние дипольного взаимодействия на резонансный спектр определяется как величиной дипольных сдвигов, так и углами поворота возбуждающими импульсами [6]. Согласно проведенному расчету, сдвиги дипольных полей не превышают расстояния между квадрупольными максимумами: из 20 атомов, включенных в рассмотрение, 16 дают сдвиги менее 0.3 МГц и лишь 4 вызывают смещение 1.0—1.4 МГц. Исходя из этого можно заключить, что дипольное взаимодействие в исследованной системе не столь велико, чтобы при возбуждении сравнительно короткими (менее 1.0 мкс) импульсами исказить или сгладить квадрупольную структуру спектров ЯМР; следовательно, оно вносит вклад в ширину и форму отдельных компонент, расщепленных за счет квадрупольного взаимодействия.

В нестехиометрическом  $\text{Mn}_{1+\delta}\text{Sb}$  ( $\delta \neq 0$ ) пространственная эквивалентность атомов каждой из рассмотренных координационных сфер наруша-

ется, что приводит к дополнительному разбросу СТ полей и нарияду с неоднородностью квадрупольного взаимодействия [7] может служить причиной исчезновения квадрупольной структуры спектров ЯМР.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Шавишвили Т. М., Ахалкаци А. М., Килиптари И. Г., Меликия М. Г. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1884—1885.
- [2] Шавишвили Т. М., Ахалкаци А. М., Килиптари И. Г. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 186—191.
- [3] Абесадзе Т. Ш., Ахалкаци А. М., Килиптари И. Г., Меликия М. Г., Шавишвили Т. М. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 1 (7). С. 187—193.
- [4] Murray G. A., Marshall W. // Proc. Phys. Soc. 1965. V. 86. P. 315—330.
- [5] Yamaguchi Y., Watanabe H. // J. Phys. Soc. Jap. 1980. V. 48. N 2. P. 435—441.
- [6] Stearns M. B. // Phys. Rev. 1975. V. B12. N 5. P. 1626—1632.
- [7] Abe H., Yasuoka H., Hirari A. // J. Phys. Soc. Jap. 1966. V. 21. N 1. P. 77—84.

Тбилисский государственный университет  
Тбилиси

Поступило в Редакцию  
2 августа 1989 г.  
В окончательной редакции  
27 октября 1989 г.

УДК 538.224

© Физика твердого тела, том 32, № 4, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 4, 1990

## ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ТЕРБИЯ

*В. В. Воробьев, М. Я. Крупоткин, В. А. Финкель*

При  $T < T_c \sim 220$  К тербий переходит из геликоидального антиферромагнитного в коллинеарное ферромагнитное состояние. В результате этого симметрия кристаллической решетки понижается от гексагональной до ромбической [1], а магнитные моменты устанавливаются параллельно оси  $b$  ( $\langle 010 \rangle_p$ ) ромбической решетки, т. е. вдоль «бывших» направлений  $\langle 10\bar{1}0 \rangle_r$  гексагональной решетки [2]. Сведения же о характере возникающей при этом доменной структуры в литературе практически отсутствуют, хотя реальность ее образования в ферромагнитном тербии следует из экспериментов по деполяризации нейтронов [3].

Исходя из самых общих соображений, следует, что из-за сильной одноосной анизотропии доменные стенки должны лежать в плоскости базиса (001) [4]. Однако вопрос о расположении доменов в плоскостях базиса в тербии, а тем более об эволюции его доменной структуры с изменением температуры и магнитного поля пока остается открытым.

В принципе возможно образование двух типов доменных структур: а) система параллельных доменов, разделенных  $180^\circ$ -ными блоховскими стенками, которые образуются в двух направлениях из шести  $\langle 010 \rangle_p$ ; б) система доменов, разделенных  $120^\circ$ -ными стенками, образованных во всех шести направлениях  $\langle 010 \rangle_p$  [5].

Наличие достаточно сильного понижения симметрии решетки тербия в  $T_c$  дает уникальную возможность изучить эволюцию его доменной структуры по характеру изменения рентгеновской дифракции в зависимости от температуры и магнитного поля, так как понижение симметрии должно приводить к расщеплению узлов обратной решетки по схеме  $(h, h, 2h, 0)_r \rightleftharpoons (h, 3h, 0)_p$  и  $(2h, 0, 0)_p$  [6]. Можно показать, что для первого типа доменных структур должна наблюдаться только одна из двух ромбических компонент, а для второго — две компоненты с соотношением интегральных интенсивностей 2 : 1.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Это соотношение следует из того, что атомный и структурный факторы у плоскостей  $(h, 3h, 0)_p$  и  $(2h, 0, 0)_p$  одинаковы. (Фактически речь идет лишь о различной