

- [3] Axe J. D., Iizumi M., Shirane G. *Incommensurate Phases in Dielectrics*, 2. Materials / Ed. R. Blinc and A. P. Levanyuk. N. Holland, 1986. P. 23—33.
 [4] Gesi K. // *Ferroelectrics*. 1986. V. 66. N 1/2/3/4. P. 269—286.

Институт кристаллографии
 АН СССР
 Москва

Поступило в Редакцию
 11 марта 1990 г.

УДК 536.48.537.622

Физика твердого тела, том 32, № 9, 1990
 Solid State Physics, vol. 32, N 9, 1990

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФТОРОСИЛИКАТА НИКЕЛЯ И ЕГО ИЗОМОРФНЫХ РАСТВОРОВ $Ni_x(Zn_{1-x})SiF_6 \cdot 6H_2O$

*Б. Р. Герман, В. П. Дьяконов, Б. Е. Квятковский, В. П. Плахтий,
 В. А. Тележкин*

Особенности термодинамических свойств и характер магнитных взаимодействий в гейзенберговском ферромагнетике $NiSiF_6 \cdot 6H_2O$ окончательно не установлены [1, 2]. Используемое [2] приближение молекулярного поля для объяснения механизмов магнитного упорядочения фторосиликата никеля дает лишь качественное описание магнитных свойств этого кристалла. Для корректного решения задачи о гейзенберговском анизотропном магнетике необходим учет флуктуационных эффектов.

Был применен метод машинного моделирования Монте-Карло (МК) по классической схеме Метрополиса [3] с периодическими граничными условиями на ПКР-решетке $10 \times 10 \times 10$ для концентрированной и $16 \times 16 \times 16$ для разбавленной системы с числом конфигураций 1500 МК/спин. Свойства $Ni_x(Zn_{1-x})SiF_6 \cdot 6H_2O$ изучались в модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} S_i \sigma_i S_j \sigma_j - D \sum_i (S_i^z \sigma_i)^2, \quad (1)$$

где $\sigma_{i,j} = 1$ (если узел занят), $\sigma_{i,j} = 0$ (если замещен), $D > 0$ — одноионная анизотропия, а спин является квазиклассическим нормированным

$$S = S/\sqrt{S(S+1)} \quad (S^z = \cos \theta, \quad S^x = \sin \theta \cos \varphi, \quad S^y = \sin \theta \sin \varphi).$$

Термодинамические величины энергии, магнитной восприимчивости, магнитной теплоемкости и средней намагниченности на один узел вычислялись по стандартным формулам [4].

Для сравнения с существующими гипотезами, объясняющими магнитное поведение изучаемого объекта [1], имитирование проводилось в модели с ближайшими соседями (БС) магнитного иона — со вторыми, третьими, имеющими соответственно $\lambda_1 = J_2/J_1 = -0.42$ и $\lambda_2 = J_3/J_1 = 0.4$ (при $J_1 = 1$, $D/J_1 = 3.7$). Все значения брались из ЭПР [5].

По полученным зависимостям термодинамических величин от нормированной температуры определялось соотношение $kT_c/J_1 S(S+1)$ в точке фазового перехода ПМ—ФМ, откуда путем сравнения с экспериментальной $T_c^{\text{экс}}$ извлекались значения обменных констант.

В результате численного моделирования по возникновению спонтанной намагниченности на кривой $m(T)$ и пикам на температурных зависимостях восприимчивости и теплоемкости найдено соотношение для неразбавленного ФМ

$$kT_c/J_1(S+1)S = 1.78 \pm 0.02 (D/J_1 = 3.7, P=0), \quad (2)$$

откуда получена константа обмена $J_1 = 43.5 \pm 0.5$ мК (при $T_c^{\text{эксп}} = 155$ мК), что в пределах погрешности совпадает с $J_1 = 43.4$ мК из измерений ЭПР [5] для 5%-ной разбавленной системы. Полученная зависимость $T_c(x)$ подтверждает постоянство обменного интеграла при разбавлении вплоть до порога перколяции $x \approx 0.31$.

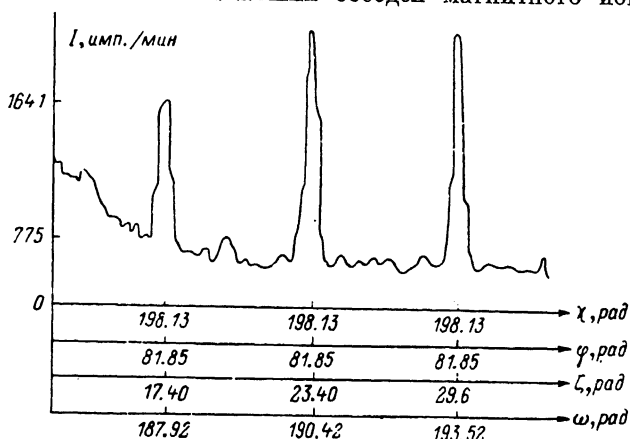
Сравнение с данными по магнитной теплоемкости фторосиликата никеля, полученными Бензи и Куком при $T \approx 1$ К [6]

$$C_M T^2 / R = 0.0139 \text{ (К)}^2, \quad (3)$$

дает следующие соотношения

$$\frac{C_M T^2}{R} = \begin{cases} 0.0207 \text{ (К)}^2, \\ 0.0161 \text{ (К)}^2, \\ 0.0145 \text{ (К)}^2. \end{cases}$$

Здесь также наблюдается хорошее согласие с экспериментом при учете взаимодействия только ближайших соседей магнитного иона.



Фрагмент нейтронограммы $\text{Ni}_{50}\text{Zn}_{50}\text{SiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ в направлении [100].

При таком подходе расхождения расчетного и экспериментального значения константы θ в законе Кюри—Вейсса для восприимчивости могут быть связаны с определенными погрешностями измерений при температурах ниже 1 К [1].

Проведенный анализ говорит о достаточности учета изотропных обменных взаимодействий в первой координационной сфере для объяснения наблюдаемой в эксперименте $T_c^{\text{эксп}}$ и правильности идентификации первой обменной константы из спектра ЭПР [5]. К тому же аналогичные расчеты для кристаллов с учетом вторых и третьих магнитных соседей дают значение $kT_c/J_1(S+1)S = 1.2 \pm 0.02$, заниженное по сравнению с величиной (2).

Линии, наблюдаемые в спектре ЭПР и связываемые ранее [1, 5] с обменным интегралом во второй и третьей координационных сферах, можно отнести на счет диполь-дипольных взаимодействий. Такой подход согласуется также с работами, например, Зайделя и Сваре [7], Фридберга [8].

В связи с гипотезой о неравновероятном распределении ионов никеля и цинка при разбавлении [9], что в случае антиферромагнитного знака константы обмена во второй координационной сфере могло бы привести к общему отрицательному эффективному обмену при низких концентрациях магнитного иона, была проведена экспериментальная проверка характера распределения методом упругого рассеяния нейтронов.

На монокристаллических образцах $\text{Ni}_x(\text{Zn}_{1-x})\text{SiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ изучались дифракционные отражения упругорассеянных тепловых нейтронов. Исследования проводились на четырехкружном дифрактометре с германие-

вым монохроматором (угол $2\theta = 30^\circ$), на длине волны $\lambda = 1.677 \text{ \AA}$ в нейтронном пучке $2 \cdot 10^5$ нейтрон/с·см², получаемом в ЛИЯФ им. Б. П. Константинова.

Времена измерения интенсивности в эксперименте были сравнимы с характерными временами неупругого рассеяния: основным на образце формы гексагональной призмы является рефлекс [111]; вклад высших порядков при этом не подавлялся.

В результате измерений кристалла $\text{Ni}_{50}\text{Zn}_{50}\text{SiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ не обнаружено какой-либо мозаичности образца, нет ни сверхструктурных (т. е. упорядоченных) пиков в распределении тандема атомов никель—цинк, ни диффузных (говорящих о кластеризации) как между основными рефлексами, так и в их положениях, в направлениях, являющихся основными [100], [111], [110] (см. рисунок). Это означает, что при диамагнитном замещении атомов никеля атомами цинка в гейзенберговском ферромагнетике $\text{Ni}_x(\text{Zn}_{1-x})\text{SiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ распределение носит чисто статистический равновесный характер.

Следовательно, вопрос о смене знака эффективного обмена при концентрации никеля $x < 0.18$ [9] остается открытым.

Авторы благодарят С. С. Аплеснина и Г. А. Петраковского за постоянный интерес и помощь в работе.

Список литературы

- [1] Валишев Р. // Уч. записки КазГУ. 1967. Т. 127. Кн. 6. С. 35—54.
- [2] Дьяконов В. П., Левченко Г. Г., Фита И. М., Цинцадзе Г. А. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 6. С. 2193—2201.
- [3] Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. М., 1982. 389 с.
- [4] Петраковский Г. А., Аплеснин С. С. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 4. С. 1167—1171.
- [5] Галкин А. А., Кожухарь А. Ю., Цинцадзе Г. А. // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. № 1. С. 248.
- [6] Benzie R., Cooke A. // Proc. Phys. Soc. 1950. V. A63. P213.
- [7] Svare J., Seidel G. // Phys. Rev. 1964. V. 134. P. 172.
- [8] Friedberg A. e. a. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 5. P. 2817—2824.
- [9] Дьяконов В. П., Левченко Г. Г., Фита И. М., Цинцадзе Г. А. // ФНТ. 1984. Т. 10. С. 204—207.

Донецкий физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
12 марта 1990 г.

© Физика твердого тела, том 32, № 9, 1990
Solid State Physics, vol 32, N 9, 1990

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ НА МЕЖЗОННОЕ МАГНЕТОПОГЛОЩЕНИЕ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Э. П. Синяевский, Е. Ю. Сафронов

В работе исследуется влияние интенсивной звуковой волны на коэффициент поглощения света в полупроводниках, у которых форма пиков магнетопоглощения определяется слабым электрон-фононным взаимодействием. В квантующем магнитном поле, если волновой вектор \mathbf{q} внешней звуковой волны перпендикулярен вектору напряженности магнитного поля \mathbf{H} , диагональный матричный элемент оператора взаимодействия электрона со звуковой волной на волновых функциях зонного электрона [1] ($\mathbf{q} \parallel \mathbf{y}$) отличен от нуля и равен

$$V_{\alpha\alpha}(t) = u^0 q E^{(e, h)} e^{-q^2 R^2 / 4} L_n(q^2 R^2 / 2) \sin(\omega t + q k_x R^2), \quad (1)$$

$\alpha(n, k_x, k_z)$ — квантовые числа электрона в магнитном поле; u^0 — амплитуда смещения; $E^{(e)}$, $E^{(h)}$ — константы деформационного потенциала