

УДК 538.11, 538.21, 538.245

ТЕРМОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МАГНЕТИКОВ

А. И. Мицек, К. Ю. Гуслиенко

Многоэлектронные спектры редкоземельных ферро- и ферримагнетиков рассчитываются в приближении, линейном по динамическим частям операторов углового момента. Магноны рассматриваются как дипольные переходы между уровнями энергии редкоземельных ионов в кристаллическом поле, уширенных межзонным обменным взаимодействием в полосы. Рассчитываются перенормировка обменной жесткости, температурные зависимости намагниченностей подрешеток и редкоземельного вклада в константы анизотропии ферримагнетика. Сравнение с экспериментом проводится для интерметаллидов типа $R_2Fe_{14}B$.

Сильная спин-орбитальная внутриионная связь в редкоземельных (РЗ) ионах обуславливает прямую связь оператора кристаллического поля \mathcal{H}_{CF} с оператором одноионной магнитной анизотропии $\mathcal{H}_A(\mathbf{J}_R)$ [1, 2]. Локальные эффекты кристаллического поля оказываются сравнимыми с коллективным межзонным обменным взаимодействием $A(|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|)$. Низкие точки T_c и T_N в РЗ соединениях обосновывают применение к ним модели синглетного магнетизма (см. обзор в [3-5]). В пределе слабого обменного взаимодействия иногда (не всегда; см. [4]) применимо приближение среднего поля. Рассчитанные в таком приближении многоэлектронные полосы и спектры возбуждений [4] ферромагнитных РЗ соединений сближают данную теорию с общим методом спиновых волн и экситонов.

Прямой расчет методом функций Грина [6-8] приводит к результатам, близким к выводам приближения среднего поля, однако не согласуется с выводами спин-волновой теории [1]. Когда направление намагниченности РЗ подрешетки несимметрично, возникает проблема направления оси квантования [9, 10]. При наличии анизотропных слагаемых в гамильтониане уже невозможен переход к классическому уравнению движения намагниченности (уравнению Ландау—Лифшица). Трудности проистекают из-за того, что составляющая оператора момента РЗ иона вдоль направления намагниченности не является интегралом движения. Это приводит к квантовому сокращению модуля намагниченности и неоднократно наблюдалось в РЗ соединениях экспериментально [2]. Попытки расчетов магнитных возбуждений в антиферро- и ферримагнетиках также имеют дополнительные сложности, связанные с дефектом намагниченности $\Delta M_0 = M_0 - M(0)$, где M_0 — номинальная, а $M(0)$ — наблюдаемая намагниченность при $T=0$. Величины вращающих моментов магнетика (его констант анизотропии) оказываются разными в пределах сильного и слабого обменного взаимодействия [5]. Для расчета тепловых, упругих, кинетических и других свойств РЗ магнетиков необходимо также знание спектров фононов и электронов. Делокализация за счет гибридизации и обменного взаимодействия приводит к узким полосам тяжелых $4f$ -электронов, масса которых зависит от температуры через квадрупольный параметр порядка [4].

При построении теории магнонов и многоэлектронных спектров будем исходить из гамильтониана как функционала ионных операторов момента

$\mathcal{H}_f [J_R]$ для $4f$ -подрешетки и спинового гамильтониана $\mathcal{H}_d [S_r]$ для $3d$ -подрешетки. Уравнения движения для операторов J_R решаем в линейном приближении для их динамических частей $\tilde{J}_q^\pm(t)$, что позволяет рассмотреть произвольные величины ионных моментов J . Таким способом случаи одноионного и спин-волнового пределов объединяются в рамках единого подхода. Спектр одноосного РЗ ферромагнетика рассчитывается в п. 1. Дисперсионное уравнение носит операторный характер, его проекция на пространство собственных функций оператора $J^z |J, m\rangle$ дает переходы между многоэлектронными полосами $E_m^{(J)}(\theta, \mathbf{q})$, где \mathbf{q} — волновой вектор, угол $\theta=0$ (в фазе «ось легкого намагничивания» — ОЛН) или $\pi/2$ (в фазе «плоскость легкого намагничивания» — ПЛН). Расчет ферромагнитных интерметаллидов (типа R—Co или $R_2(\text{Fe}, \text{Co})_{14}\text{V}$ и др.) в п. 2 приводит к системе уравнений для $\tilde{J}_q^\pm(t)$ и $S_q^\pm(t)$. Операторное дисперсионное уравнение в матричной форме похоже на таковое для обычной ферромагнитной спин-волновой задачи в пределе сильного обменного взаимодействия. После проектирования его на пространство $|J, m\rangle$ получаем $4J$ ветвей, из которых $2J$ ветвей сопоставляются магнонам (акустическим при малых q в пренебрежении магнитной анизотропией $3d$ -подрешетки). В пределе большого параметра k одноионной РЗ анизотропии другие $2J$ ветвей описывают переходы между многоэлектронными $4f$ -полосами. Однако даже в пределе $|k| \ll |A_q|$ (A_q — обмен между РЗ и $3d$ -подрешетками) ветви дипольных возбуждений $E_{m \rightarrow m-1}(\mathbf{q})$ имеют большую цель, что позволяет рассчитывать редкоземельную намагниченность и константу результирующей магнитной анизотропии $K_1(T)$ в приближении среднего поля (см. п. 3).

1. Ферромагнеты в пределе слабого обменного взаимодействия

Парамагнитная ван-Флековская система РЗ ионов с собственными состояниями $|J, m\rangle$ заметно изменяет свои свойства при включении меж-ионного обменного взаимодействия. Для одноосного кристалла в фазе ОЛН гамильтониан

$$\mathcal{H} = -k \sum_r (J_r^z)^2 - h \sum_r J_r^z - \sum_{r, \rho} A(\rho) J_r J_{r+\rho} \quad (1)$$

описывает расщепление одноионных уровней в многоэлектронные полосы $E_m^{(J)}(\theta, \mathbf{q})$ в пределе слабого обменного взаимодействия. Уравнения движения моментов получаем в линейном приближении, выделяя динамическую часть \tilde{J}_r

$$J_r = \hat{J} + \tilde{J}_r, \quad \tilde{J}_q^\alpha = \frac{1}{N} \sum_r J_r^\alpha e^{-i\mathbf{q}r}, \quad \alpha = z, +, - \quad (2)$$

оператора момента иона. Полагая

$$A_q = \sum_\rho A(\rho) e^{i\mathbf{q}\rho}, \quad \sum_\rho A(\rho) J_{r+\rho}^\alpha J_r^\beta \cong A_0 J_r^\alpha J_r^\beta \quad (3)$$

для ионов, окружающих данный узел r , и учитывая коммутативность в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$)

$$[J_q^\pm, J_r^\pm] = O(1/N), \quad J_q^\pm |J, m\rangle = |J, m\rangle J_q^\pm + O(1/N), \quad (4)$$

получаем уравнение движение в форме

$$\{(E + k - h - 2J_r A_0)I - 2(k - A_q)J^z\} J_q^\pm |J, m\rangle = 0, \quad (5)$$

где единичная матрица и \hat{J}^z диагональны в $(2J+1)$ -мерном пространстве. Поскольку $\tilde{J}_q^\pm |J, J\rangle = 0$, операторное дисперсионное уравнение (5) разби-

вается на $2J$ линейных уравнений, дающих спектр ферромагнетиков фазы ОЛН

$$E_{m \rightarrow m-1}(\mathbf{q}) = h + k(2m-1) + 2(J_T A_0 - mA_{\mathbf{q}}). \quad (6)$$

Для $m=J=J_T$ (6) переходит в известный спектр магнетиков $\mathcal{E}_{\mathbf{q}}$ в пределе сильного обменного взаимодействия [1]. Из (6) находим многоэлектронные полосы энергии

$$E_m^{(J)}(0, \mathbf{q}) = -(h + 2J_T A_0)m - km^2 + m(m+1)A_{\mathbf{q}}, \quad (7)$$

которые (без последнего члена) переходят в одноионные уровни в приближении среднего поля. Этот вывод согласуется с экспериментами [11], обнаружившими сохранение энергий полос магнитных возбуждений выше T_c в Pr и Pr₃Tl.

Термодинамика рассчитывается на основе статистической суммы

$$Z = \prod_{\mathbf{q}} Z_{\mathbf{q}}, \quad Z_{\mathbf{q}} = \sum_m \exp\{-\beta E_m^{(J)}(\theta, \mathbf{q})\}, \quad \beta = 1/k_B T, \quad (8)$$

в которой при низких T можно учитывать только два нижних уровня $m=J$ и $J-1$ (для дипольных переходов $\Delta m=1$). Термодинамический потенциал (ТДП)

$$F \simeq \sum_{\mathbf{q}} E_{J-1}^{(J)}(0, \mathbf{q}) - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{q}}}) \quad (9)$$

заметно отличается от ТДП в приближении среднего поля, что сильно влияет на температурную зависимость намагниченности

$$M(T) \simeq \mu_B g_J N J (1 - n_T), \quad n_T = \frac{1}{N J} \sum_{\mathbf{q}} (1 + e^{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{q}}})^{-1}. \quad (10)$$

Число магнетиков n_T , полученное в таком двухуровневом приближении, описывается функцией распределения Ферми с нулевым химпотенциалом. Из (10) при $k \rightarrow 0$ получаем закон Блоха. В пределе слабого обменного взаимодействия ($k \geq A_0$) получаем экспоненциальные зависимости $M(T)$ подобно приближению среднего поля.

Неадекватные и несогласующиеся между собой результаты получены в [7, 12] для фазы ПЛН. В этом случае намагниченность $M \parallel \mathbf{H} \parallel O_x$. Вместо (1) получаем гамильтониан ($z \rightleftharpoons x$)

$$\mathcal{H} = \frac{k}{4} \sum_{\mathbf{r}} (J_{\mathbf{r}}^+ + J_{\mathbf{r}}^-)^2 - h \sum_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}}^z - \sum_{\mathbf{r}, \rho} A(\rho) J_{\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}+\rho}. \quad (11)$$

Система линеаризованных уравнений движения с учетом (2)–(4)

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_{\mathbf{q}}^{++} & -\hat{R}_{\mathbf{q}}^{+-} \\ \hat{R}_{\mathbf{q}}^{-+} & \hat{R}_{\mathbf{q}}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{J}_{\mathbf{q}}^+ \\ \hat{J}_{\mathbf{q}}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{P}_{\mathbf{q}}^+ \\ \hat{P}_{\mathbf{q}}^- \end{pmatrix},$$

$$R_{\mathbf{q}}^{\pm-}(E) = (E + h - k/2 + 2J_T A_0) I + (k - 2A_{\mathbf{q}}) \hat{J}^{\pm} = -R_{\mathbf{q}}^{\mp+}(-E), \quad R^{+-} = R^{-+} = k(\hat{J}^{\pm} - 1/2), \quad (12)$$

где операторы $\hat{P}_{\mathbf{q}}$ описывают взаимодействие с другими подсистемами кристалла. Условие нетривиальности решений системы уравнений (12) (диагональных в пространстве $|J, m\rangle$) приводит к операторному секулярному уравнению

$$\hat{R}^{-+} + \hat{R}_{\mathbf{q}}^{-} (\hat{R}^{+-})^{-1} \hat{R}_{\mathbf{q}}^{+} = 0, \quad (13)$$

которое в представлении $|J, m\rangle$ распадается на $2J$ уравнений. Линейная зависимость операторов \hat{R}^{ij} от E факторизует (13). Получаем $2J$ квадратных уравнений дисперсии, дающих $2J$ ветвей

$$E_{m \rightarrow m-1}^{\pm}(\mathbf{q}) = (F_{\mathbf{q}}^{\pm} - k^2(m-1/2)^2)^{1/2}, \quad F_{\mathbf{q}} = h + k(m-1/2) + 2(J_T A_0 - mA_{\mathbf{q}}), \quad (14)$$

из которых можно найти многоэлектронные полосы $E_m^{(j)}(\pi/2, \mathbf{q})$. Для расчета тепловых свойств снова используем (8)–(10). При низких T энергия ферромагнетиков

$$E_{J \rightarrow J-1}(\mathbf{q}) = \{(\hbar + 2(J_T A_0 - J A_{\mathbf{q}}) + k(2J - 1)) \{ \hbar + 2(J_T A_0 - J A_{\mathbf{q}}) \}^{1/2}\} \quad (15)$$

соответствует пределу сильного обменного взаимодействия. При $k > A_0$ энергии магнов оказываются близкими как при $T < T_c$, так и при $T > T_c$ в согласии с неупругим рассеянием нейтронов ниже и выше T_c [11, 13].

При использовании принципа соответствия уравнения движения (12) не сводятся к классическим уравнениям движения магнитных моментов (например, уравнению Ландау—Лифшица). К локальным уравнениям движения плотности намагниченности уравнения (12) сводятся только в пределе $k/A_0 \rightarrow 0$, когда можно не рассматривать расщепление ионных состояний $|J, \mathbf{q}\rangle$ на полосы $|J, m, \mathbf{q}\rangle$ (что соответствует расщеплению состояний $|J\rangle$ на одноионные уровни $|J, m\rangle$ в кристаллическом поле). Исходя из схемы многоэлектронных полос (7), можно найти комбинированные переходы с $\Delta m \geq 2$, соответствующие квадрупольным и другим правилам отбора. Для них, вообще говоря, можно рассматривать уравнения движения для квадрупольных Q , трехспиновых, четырехспиновых и других (см. [4]) параметров магнитного порядка, которые добавляются к уравнениям движения для \mathbf{J}_r . При исследовании динамики потребуется добавление к уравнениям движения намагниченности уравнений движения для магнитных мультиполей более высокого порядка. Для построения этих уравнений разлагаем одноузельную матрицу плотности $\rho(\mathbf{r})$ и гамильтониан (в приближении среднего поля) по неприводимым тензорным операторам (НТО) $T_{KQ}(\mathbf{r})$, построенных на операторе момента J_r [14]

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \sum_K (t_K \cdot T_K(\mathbf{r})), \quad \mathcal{H}(\mathbf{r}) = \sum_K (a_K \cdot T_K(\mathbf{r})), \quad t_{KQ} = \\ &= \text{Sp}(\rho T_{KQ}), \quad K, \alpha \leq 2J, \quad |Q| \leq K, \end{aligned} \quad (16)$$

где использовано скалярное произведение НТО [14]. Уравнение движения для $\rho(\mathbf{r})$ позволяет построить альтернативную спиновую динамику, соответствующую пределу сильной анизотропии. Из (16) получаем уравнение движения мультипольных моментов

$$\begin{aligned} i \frac{\partial t_K}{\partial t} &= - \sum_{x, x'} \lambda_{xx'}^K (t_x \times a_{x'})_K, \quad \lambda_{xx'}^K = [(-1)^{x+x'} - \\ &- (-1)^K] [(2x+1)(2x'+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} K & x & x' \\ J & J & J \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\begin{Bmatrix} K & x & x' \\ J & J & J \end{Bmatrix}$ — 6j-символы Вигнера, $(t_x \times a_{x'})_{KQ}$ — тензорное произведение НТО [14]. Их решение позволяет найти мультипольные частоты и интегралы движения, отличные от составляющих вектора намагниченности.

2. Ферримагнетик.

Многоэлектронные спектры 4f- и 3d-подрешеток

Рассматриваем 3d-подрешетку в импульсном $|S, \mathbf{q}\rangle$ представлении. Полагаем константу одноосной магнитной анизотропии 3d-подрешетки k_d малой, а спектр затравочных магнов сплошным $\varepsilon_{\mathbf{q}}^d = \mu_B g_d (H + H_A) + 2S_T (B_0 - B_{\mathbf{q}})$, где параметр внутриподрешеточного обмена $B_0 \gg A_0$. Рассмотрим фазу ОЛН, $\theta = 0$. К первым двум членам гамильтониана (1) добавляем гамильтониан межподрешеточного ферримагнитного обменного взаимодействия

$$\mathcal{H}_{ex} = \sum_{\mathbf{R}, \rho} A(\rho) (J_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}+\rho}) = - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{R}} A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \left[\{J^z, S_{\mathbf{q}}^z\} + \frac{1}{2} (\{J_{\mathbf{R}}^+, S_{\mathbf{q}}^+\} + \text{э. с.}) \right], \quad (18)$$

где введены антикоммутирующие операторы $\{\dots, \dots\}$ для симметризации уравнений движения. Поскольку числа ионов разных подрешеток $N_d \neq N_f$ (обмен внутри РЗ подрешетки считается пренебрежимо малым), обменные поля, действующие на разные подрешетки, оказываются резко различными.

Пренебрегаем рассеянием магнонов ($S_r^z \rightarrow S_0^z$) и, полагая $S_r^\pm = \tilde{S}_r^\pm$, с учетом (2) находим систему уравнений движения

$$\begin{pmatrix} E - \hbar - k(2J^z - 1) - A_{0f}S_T & A_{qf}J^z \\ -A_{qd}S_T & E + \varepsilon_q^d + A_{0d}J^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{\mathbf{q}}^+ \\ \tilde{S}_{-\mathbf{q}}^- \end{pmatrix} = 0, \quad (19)$$

где

$$A_{qf} = \sum_{\mathbf{r}} A(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{r})}, \quad A_{qd} = \sum_{\mathbf{R}} A(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{r})}. \quad (20)$$

Проекция системы (20) на пространство $|J, m\rangle$ собственных функций оператора \tilde{J}^z приводит к $2J$ -мерному матричному уравнению, которое из-за блочной диагональности распадается на $2J$ пар уравнений. Для исходного уровня m (перехода $|J, m\rangle \rightarrow |J, m-1\rangle$) получаем две ветви возбуждений

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{q}, m}^{\pm} &= \frac{1}{2} \{ \Omega_{\mathbf{q}, m}^{\pm} \pm [(\Omega_{\mathbf{q}, m}^{\pm})^2 - 4mS_T A_{qf} A_{qd}]^{1/2} \}, \\ \Omega_{\mathbf{q}, m}^{\pm} &= \hbar + k(2m - 1) + A_{0f}S_T \pm (\varepsilon_{\mathbf{q}}^d + mA_{0d}), \end{aligned} \quad (21)$$

приравнивая нулю определитель каждой из пар уравнений.

Оптическая ветвь при малых q заменой под знаком корня $A_{qj} \rightarrow A_{0j}$ ($\hbar, k \ll A_0$)

$$E_{\mathbf{q}, m}^+ = \hbar + k(2m - 1) + (A_{0f}S_T - mA_{0d}) + \varepsilon_{\mathbf{q}}^d mA_{0d} / |A_{0f}S_T - mA_{0d}| \quad (22)$$

может рассматриваться как многоэлектронная (переходы между полосами состояний $|J, m, q\rangle$), а акустическая

$$-E_{\mathbf{q}, m}^- \simeq \bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}, m} = \varepsilon_{\mathbf{q}}^d A_{0f}S_T / |A_{0f}S_T - mA_{0d}| \quad (23)$$

выглядит как перенормированная магнонная частота изолированной $3d$ -подрешетки. Для ветви $m=J$ перенормировка (увеличение) как щели, так и обменной жесткости $\tilde{D}_J = D / |1 - (JA_{0f}/A_{0d})|$ оказывается наибольшей.

Рассматривая (22) как переход между полосами m и $m-1$, находим сами полосы при $A_{0f} \gg A_{0d}$

$$E_m^{(J)}(0, \mathbf{q}) = -(\hbar + A_{0f}S_T)m - km^2 + \frac{1}{2} A_{0d}m(m+1) \{ (1 - \varepsilon_{\mathbf{q}}^d / (A_{0f}S_T)) \}. \quad (24)$$

Термодинамический потенциал (ТДП) ферромагнетика складывается теперь из ТДП магнонных ветвей (23) $F_m^{(S)}$ и ТДП состояний (24) $F^{(J)}$. Получаем, следуя (8),

$$F^{(J)} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln Z_{\mathbf{q}}, \quad Z_{\mathbf{q}} = \sum_m \exp \{ -\beta E_m^{(J)}(0, \mathbf{q}) \}. \quad (25)$$

Поскольку магнонные состояния $|S, \mathbf{q}, m\rangle$ получают расщеплением магнонной полосы (с перенормировкой) $\varepsilon_{\mathbf{q}}^d$, то

$$F_m^{(S)} = F_{0m} + \sum_{\mathbf{q}} \bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}, m} n_{\mathbf{q}, m}(\bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}, m}), \quad (26)$$

где $n_{\mathbf{q}, m}$ — магнонная функция распределения. Ее расчет связан с прямым расчетом парного спинового коррелятора и требует тех же доказательств, что и при расчете ферромагнитных функций распределения. В энергию основного состояния F_{0m} входят энергии магнитной анизотропии, зеемановского и обменного взаимодействия при $T=0$.

Из (26) получаем среднюю намагниченность $3d$ -подрешетки в виде

$$S_T = S - \frac{1}{N_d} \sum_{\mathbf{q}, m} n_{\mathbf{q}, m}(\varepsilon_{\mathbf{q}, m}) f_m(T), \quad (27)$$

где $f_m(T)$ — относительная заселенность полос $|J, m, \mathbf{q}\rangle$. При низких T заселена только нижняя полоса ($m=J$) и $f_m \approx \delta_{Jm}$. При $T > A_{0f}$ $S_T/k_B = T_{xx}^{fd}$ все уровни заселены одинаково и $f_m = 1/(2J+1)$, а энергии возбуждений

$$-E_{\mathbf{q}, m}^- = \varepsilon_{\mathbf{q}}^d + mA_{0d} - 2mS_T A_{\mathbf{q}f} A_{\mathbf{q}d} / \varepsilon_{\mathbf{q}}^d \quad (28)$$

дают неперенормированную обменную жесткость магнонов (при не слишком малых по сравнению с единицей безразмерных q) и

$$E_{\mathbf{q}, m}^+ = h + k(2m-1) + A_{0f}S_T - 2mS_T A_{\mathbf{q}f} A_{\mathbf{q}d} / \varepsilon_{\mathbf{q}}^d \approx \\ \approx E_{0, m}^+ - \frac{m\omega_f}{q^2}, \quad \omega_f = \frac{2S_T A_{0d} A_{0f}}{D}. \quad (29)$$

Фактор дисперсионного члена в (29) мал, что делает ветвь $4f$ -возбуждений похожей на ветвь ядерных магнонов в ферромагнетике или на опти-

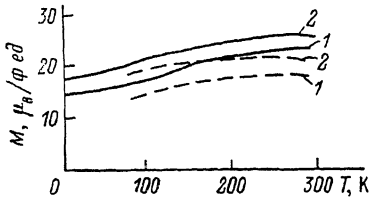


Рис. 1. Зависимости намагниченности от температуры.

1 — $\text{Er}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ($A_{fd} = 52$ К), 2 — $\text{Tm}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ($A_{fd} = 43$ К). Штриховые линии — эксперимент [15].

ческую ветвь фононов со слабой дисперсией. Из (29) получаем полосы

$$E_m^{(J)}(0, \mathbf{q}) = -(h + A_{0f}S_T)m - km^2 + m(m+1)\omega_f/q^2. \quad (30)$$

На основе формул (25) и (30) находим намагниченность РЗ подрешетки, практически равную таковой в приближении среднего поля (для $m\omega_f \ll \ll E_{0, m}^+$)

$$J_T = J - \frac{1}{N_f} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_m (J-m) \exp[-\beta(E_m^{(J)} - E_J^{(J)})] \right\} / \sum_m \exp[-\beta(E_m^{(J)} - E_J^{(J)})]. \quad (31)$$

Расчитанные в пренебрежении последним членом в (30) намагниченности ферримагнетиков $\text{Er}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ и $\text{Tm}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (рис. 1) удовлетворительно согласуются с экспериментом [15]. Намагниченность Fe-подрешетки считалась не зависящей от T при низких $T < T_c/2$ и известной по измерениям на $\text{Y}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ [15, 16]. При $T < T_{xx}^{fd}$ для расчета J_T исходим из (24), подставляя его в (31). Ограничиваясь $m=J$ и $m=J-1$, находим из (31) выражение типа (9)

$$J_T = J - \frac{1}{N_f} \sum_{\mathbf{q}} \{1 + \exp(\beta E_{\mathbf{q}, J}^+)\}^{-1}, \quad (32)$$

где, согласно (22),

$$E_{\mathbf{q}, J}^+ = E_0 + \tilde{D}_J q^2, \quad E_0 = h + k(2J-1) + (A_{0f}S_T - A_{0d}J). \quad (33)$$

Для $h, k \ll A_0$ при компенсации $A_{0f}S_T = A_{0d}J$ получаем для J_T в (32), согласно (33) (большая обменная жесткость \tilde{D}_J и малая щель E_0), закон «3/2» Блоха. В обратном случае (большая E_0 и жесткость $\tilde{D}_J < D$) получаем даже при низких температурах функцию Бриллюэна

$$J_T \approx JB^{\frac{3}{2}}(\beta E_0^+), \quad E_0^+ = A_{0f}S_T,$$

но от аргумента, зависящего от среднего спина $3d$ -подрешетки. Только при $T > T_{xx}^{fd} \sim 10^2$ К кривая $J_T(T)$ выходит на гиперболу $\sim T^{-1}$.

Магнитная энтропия и теплоемкость на основе (25)—(26) также представляются в виде суммы спин-волнового вклада и вклада ветвей коллективных возбуждений РЗ ионов.

3. Константы магнитной анизотропии в РЗ интерметаллидах $R_2Fe_{14}B$

Применим теперь развитую выше теорию для описания констант магнитной анизотропии в тетрагональных соединениях типа $R_2Fe_{14}B$. Элементарная ячейка данного интерметаллида содержит 68 атомов. Выделяется одна Fe-подрешетка и две $[1^7]$ или четыре $[1^8]$ РЗ подрешетки, дающие конкурирующие вклады в орторомбическую магнитную анизотропию. Используя результат п. 2, вводим затравочное значение T_c , константу одноосной анизотропии Fe-подрешетки $K_{1Fe}(T)$ и ее намагниченность. Для приложений этих интерметаллидов в качестве постоянных магнитов глав-

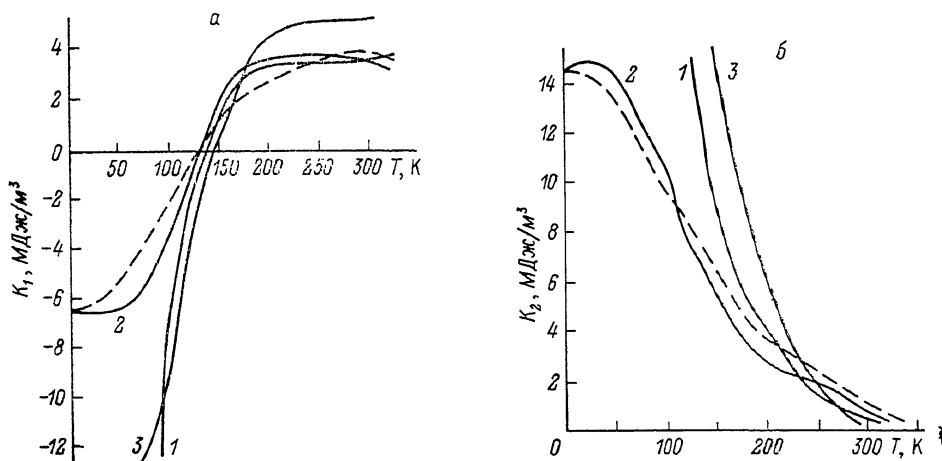


Рис. 2. Температурные зависимости констант анизотропии $Nd_2Fe_{14}B$: $K_1(T)$ (а) и $K_2(T)$ (б).

1 — расчет на основе (37); 2, 3 — эксперимент $[20]$ и $[21]$. Штриховые кривые — подгонка по $K_1(0)$, $K_2(0)$.

ную роль играют зависимости $K_1(T)$ и $K_2(T)$, в которые главные вклады дают РЗ подрешетки (для простоты далее рассмотрение будет статистическим путем сведено к одной РЗ подрешетке).

Гамильтониан записываем в приближении среднего поля

$$\mathcal{H}_f = \mathcal{H}_{CF} + \mathcal{H}_{ex}, \quad \mathcal{H}_{CF} = \sum_{i\mu} B_i^\mu O_i^\mu, \quad \mathcal{H}_{ex} = -A_{fd}(sJ), \quad A_{fd} = A_{of}S_T, \quad (34)$$

где O_i^μ — эквивалентные операторы $[1]$. Поскольку параметры кристаллического поля $|B_i^\mu| \ll A_{fd}$ ($A_{of}/\mu_B \sim 10^2$ Тл, а $B_i^\mu \sim 1$ К $[17-19]$), то ТДП на один ион РЗ подрешетки

$$F/N_f = F_0 + \langle \mathcal{H}_{CF} \rangle_0, \quad F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} \exp(-\beta \mathcal{H}_{ex}), \quad \langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Sp} (\dots \exp(-\beta \mathcal{H}_{ex})). \quad (35)$$

Ниже предполагается, что осью Oz квантования J является направленные единичного вектора s намагниченности Fe-подрешетки, направленной под углом θ к оси кристалла. Учет орторомбического вклада проводим в модели двух РЗ подрешеток с разными знаками B_2^z . Для $B_2^z < 0$ частичный магнитный момент РЗ подрешетки имеет в базисной плоскости ОЛН ось $[100]$, а для другой РЗ подрешетки направлением легкого намагничивания в базисной плоскости будет ось $[010]$. Проводим статистическое

объединение обеих РЗ подрешеток в одну, получая для них эффективный одноосный вклад $\sim \langle (3B_2^0 + B_2^2) \rangle$. Эффективный одноосный одноконный гамильтониан магнитной анизотропии РЗ подсистемы в системе координат $Oz||s$ получаем в виде

$$\mathcal{H}_{CF} = -\frac{1}{2} (3B_2^0 + |B_2^2|) O_2^0 \sin^2 \theta - 5B_4^0 O_4^0 \sin^2 \theta + \frac{35}{8} B_4^0 O_4^0 \sin^4 \theta. \quad (36)$$

Используя и далее приближение среднего поля для вычисления мультипольных моментов $f_J = \langle (J^z)^2 \rangle_T$, $\varphi_J = \langle J^z \rangle_T$, для РЗ вклада в K_1 , K_2 получим

$$-\frac{K_{1R}(T)}{N_f k_B} = \left\{ \frac{3}{2} (3B_2^0 + |B_2^2|) + 5B_4^0 a_J \right\} f_J(T) + 175B_4^0 \varphi_J(T) + 5B_4^0 b_J - \\ - \frac{1}{2} (3B_2^0 + |B_2^2|) J(J+1),$$

$$\frac{K_{2R}(T)}{N_f k_B} = \frac{35}{8} B_4^0 [35\varphi_J(T) + a_J f_J(T) + b_J], \quad a_J = 5[5 - 6J(J+1)], \quad b_J = \\ = 3J(J+1)[J(J+1) - 2]. \quad (37)$$

Параметры кристаллического поля выражены в К. Измерения констант анизотропии $Y_2Fe_{14}B$ [16] показывают, что $K_{2Fe} \approx 0$. При низких тем-

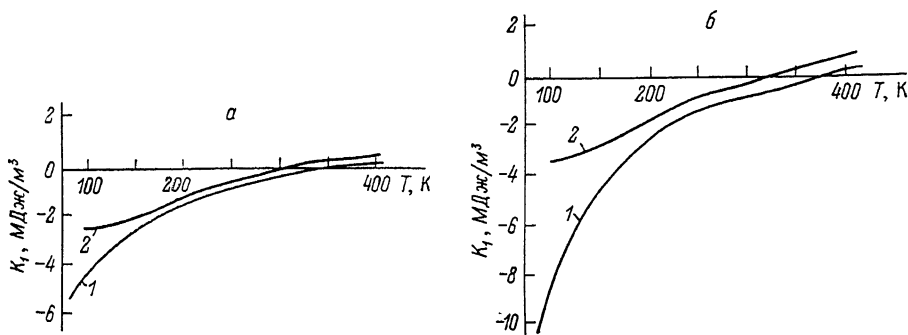


Рис. 3. Зависимости $K_1(T)$ $Er_2Fe_{14}B$ (а), $Tm_2Fe_{14}B$ (б).

1 — расчет на основе (37), 2 — эксперимент [15].

пературах вклад РЗ ионов в константы (37) велик, но быстро уменьшается с увеличением T . В $R_2Fe_{14}B$ ($R=Nd, Er, Tm$) $K_{1Fe} > 0$, а $K_{1R} < 0$, что приводит к температурным ориентационным фазовым переходам (ОФП) типа ПЛН \rightarrow ОЛН (в $Er_2Fe_{14}B$ и $Tm_2Fe_{14}B$) или «угловая фаза» \rightarrow ОЛН (в $Nd_2Fe_{14}B$) при $T=T_s$. Используя экспериментальные данные о параметрах кристаллического поля и межподрешеточного обменного взаимодействия из [17], для констант анизотропии $Nd_2Fe_{14}B$ получим сплошные кривые (рис. 2). Параметр B_4^0 выбирался из условия $K_1(T_s)=0$, где использовалась $T_s=135$ К [20]. Однако подгоночные значения не дают хорошего согласия с экспериментом при низких T [20, 21]. Поэтому используем более общую аппроксимацию, основанную на значениях $K_1(0)$, $K_2(0)$. Это дает $B_2^0 = (3B_2^0 + B_2^2)/2 = -2.16$ К, $B_4^0 = 0.0188$ К. Для получения измеренного значения T_s полагаем $A_{fd} = 201$ К. Полученные штриховые кривые (рис. 2) удовлетворительно объясняют ход экспериментальных констант анизотропии [20].

Рассчитывая температурные зависимости констант анизотропии K_1 для $R=Er, Tm$ с параметрами кристаллического поля B_2^0 и B_2^2 , обменного взаимодействия между подрешетками, взятыми из экспериментов [17-19], получаем кривые (рис. 3), находящиеся в разумном согласии с экспериментальными зависимостями $K_1(T)$ [15]. Расхождения при низких ($T < 150$ К) температурах можно устранить нормировкой на $K_1(0)$,

однако экспериментальные данные о значениях $K_1(0)$ для R=Er, Tm в настоящее время отсутствуют.

Таким образом, ОПП в $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ происходит из-за конкуренции вкладов в константу анизотропии K_1 от параметров кристаллического поля второго и четвертого порядков, а в $\text{Er}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ и $\text{Tm}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ из-за конкуренции вкладов в K_1 от Fe- и R-подрешеток.

Л и т е р а т у р а

- [1] Вонсовский С. В. Магнетизм. М., 1971. 1032 с.
- [2] Тейлор К., Дарби М. Физика редкоземельных соединений. М., 1974. 374 с.
- [3] Мицек А. И., Гуслиенко К. Ю., Павловский С. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 9. С. 2773—2781.
- [4] Мицек А. И., Гуслиенко К. Ю., Павловский С. В. // ФММ. 1983. Т. 55. № 5. С. 901—912.
- [5] Mitsek A. I., Guslienko K. Yu., Pavlovskii S. V. // Phys. St. Sol. B. 1986. V. 135. N 1. P. 173—188.
- [6] Egami T., Brooks M. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 3. P. 1029—1037.
- [7] Вальков В. В., Валькова Т. А., Овчинников С. Г. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 2. С. 550—561.
- [8] Онуфриева Ф. П. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 5. С. 1691—1707.
- [9] Носкова Л. М. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 6. С. 1669—1672.
- [10] Островский В. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 11. С. 1690—1701.
- [11] Birganeau R. J., Als-Nielsen J., Bucher E. / Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 9. P. 2724—2729.
- [12] Казаков А. А. // ТМФ. 1981. Т. 46. № 3. С. 426—429.
- [13] Rainford D., Houmann J. G. // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 26. N 20. P. 1254—1256.
- [14] Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л., 1975. 439 с.
- [15] Hiroswawa S., Sagawa M. // Sol. St. Commun. 1985. V. 54. N 4. P. 335—337.
- [16] Chin Lin, La J., Xu X. F. // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. N 8. P. 3457—3459.
- [17] Boge M., Coey J. M. D., Czjzek G. // Sol. St. Commun. 1985. V. 55. N 4. P. 295—298.
- [18] Yamada M., Yamaguchi Y., Kato H. // Sol. St. Commun. 1985. V. 56. N 8. P. 663—667.
- [19] Rechenberg H. R., Sanchez J. P., Hertier P. L. // Phys. Rev. B. 1987. V. 34. N 4. P. 1865—1871.
- [20] Otani Y., Miyajima H., Chikasumi S. // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. N 8. P. 3436—3438.
- [21] Bolzoni F., Moze O., Pareti L. // J. Appl. Phys. 1987. V. 62. N 2. P. 615—620.

Институт металлофизики АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
3 мая 1988 г.