

ВИНАЙ К. АГАРВАЛ (ИНДИЯ), Р. Н. КУЗЬМИН

ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОЛЯ НА ЯДРАХ Fe^{57} В РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 26 VI 1972)

Новые высококоэрцитивные материалы для постоянных магнитов R_2M_{17} , где R — редкоземельный металл (р.з.м.), а $\text{M} \equiv \text{Co}$, Fe имеют наибольшую магнитную энергию $(BH)_{\text{max}}$ (¹) и представляют интерес не только для практических целей, но и для теории магнетизма, поскольку в таких соединениях в совершенно неожиданной форме могут проявляться взаимодействия недостроенных 4f-оболочек р.з.м. с 3d-элементами.

В сплавах R_2M_{17} интенсивно изучаются эффективные поля на ядрах (²⁻⁷), однако из-за сложной сверхтонкой структуры (с.т.с.) мёссбауэровских спектров большинству исследователей не удалось получить каких-либо определенных сведений об эффективных полях $H_{\text{эф}}$ на ядрах Fe^{57} . Широкий класс исследованных нами ферримагнетиков R_2Fe_{17} (табл. 1)

Т а б л и ц а 1

Эффективные поля $H_{\text{эф}}$ (кэ) на ядрах Fe^{57}

Положе- ния атомов Fe	эксп.	расч.	эксп.	расч.	эксп.	расч.
	$\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}^*$		$\text{Nd}_2\text{Fe}_{17}^*$		$\text{Gd}_2\text{Fe}_{17}^*$	
6 (c)	336 $\pm$ 8	345	332 $\pm$ 8	345	359 $\pm$ 8	350
18 (f)	285	306	282	307	297	313
9 (d)	280	298	278	298	295	304
18 (h)	265	272	267	272	283	281
	$\text{Y}_2\text{Fe}_{17}^{**}$		$\text{Dy}_2\text{Fe}_{17}^{**}$		$\text{Er}_2\text{Fe}_{17}^{**}$	
4 (j)	348	348	363	356	366	356
12 (j)	304	305	317	319	318	319
6 (g)	292	296	302	310	304	305
12 (k)	273	268	292	288	292	287

* Соединения, структурный тип и пространственная группа которых $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$, $R\bar{3}m$, (D_{3d}^5) .

** $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$, $P6_3/mmc$, (D_{6h}^4) .

имеет структуры двух родственных типов: $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ (⁸) и $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ (⁹), в которых атомы железа находятся в четырех кристаллографически неэквивалентных положениях. В структуре типа $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ атомы железа занимают положения: 6(c), 9(d), 18(f) и 18(h), а в структуре типа $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ — 4(f), 6(g), 12(j), 12(k).

Определенные нами значения $H_{\text{эф}}$ на ядрах Fe^{57} приведены в табл. 1 и соответствуют четырем позициям атомов железа в решетке кристаллов. Приблизительное равенство $H_{\text{эф}}$ показывает, что обменное взаимодействие R — Fe намного слабее по сравнению с взаимодействием между атомами Fe — Fe. Так как в данных соединениях атомы железа почти в 9 раз больше, чем редкоземельных элементов, то можно предположить, что основной вклад в $H_{\text{эф}}$ дают атомы железа.

Рассматривая конфигурацию окружения каждого атома в структуре соединений типа $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ и $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$, можно отметить, что атомы железа, находящиеся в положениях: (c), (f), (d), (h) и (f), (j), (g), (k), соответственно имеют одинаковые координационные числа: 13, 14, 10 и 9 по ближайшим атомам железа, а с учетом ближайших редкоземельных ионов: 14, 13, 12, 12. Такие большие координационные числа свойственны структурам с плотной упаковкой, поэтому, полагая, что основной вклад в $H_{\text{эф}}$ на ядрах Fe^{57} определяется ближайшими соседями, можно считать соединения R_2Fe_{17} аналогами твердых растворов редкоземельных металлов в железе. Тогда, на основе рассмотрения модели теории молекулярного поля ближайших соседей и использования величины магнитных моментов ионов, предлагается следующее эмпирическое выражение для расчета $H_{\text{эф}}$ на ядрах Fe^{57} для температуры $T = 0^\circ \text{K}$:

$$H_j = K_1 \mu_{\text{Fe}} \sum_i \left(\frac{n_i^{\text{Fe}}}{r_i^{\text{Fe-Fe}}} \right)_j + K_2 \mu_{\text{R}} \sum_i \left(\frac{n_i^{\text{R}}}{r_i^{\text{Fe-R}}} \right)_j, \quad (1)$$

где n_i — число связей сорта i в положении j , i — порядковый номер межатомного расстояния $r_{ij}^{\text{(Fe-Fe; Fe-R)}}$ в структурном положении j , j — положение атомов в ячейке (c), (f), (d) и (h) для структуры типа $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ и (f), (j), (g) и (k) для структуры типа $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$; K_1 и K_2 — константы, характерные для данных структурных типов; μ_{Fe} и μ_{R} — магнитные моменты атома железа и ионов редкоземельных элементов соответственно.

Константа K_1 была определена с помощью экспериментальных значений $H_{\text{эф}}$ для соединения Y_2Fe_{17} , в котором иттрий является немагнитным элементом, а потому второй член в выражении (1) равен нулю. Константа K_2 определена с учетом константы K_1 и экспериментальных значений $H_{\text{эф}}$ для других соединений.

Из табл. 1 следует, что рассчитанные $H_{\text{эф}}$ совпадают с экспериментальными $H_{\text{эф}}$ только в предположении знака плюс у второго члена в выражении (1). Эти результаты позволяют считать, что величина магнитных полей на ядрах Fe^{57} в основном определяется поляризацией s -электронов внутренних оболочек атомов железа за счет собственного магнитного момента, а дополнительный вклад в поле $H_{\text{эф}}$ создается ионами редкоземельных элементов через поляризованные электроны проводимости, что находится в соответствии с механизмом возникновения полей $H_{\text{эф}}$, предложенного Фрименом и Ватсоном (¹⁰, ¹¹).

Настоящий подход к описанию полей на ядрах может быть распространен и на другие железосодержащие соединения.

Примечание при корректуре. После сдачи статьи в печать появилась работа А. З. Меньшикова и Е. Е. Юрчикова (¹²), в которой приведена формула (7), аналогичная нашей формуле (1), что отвечает одинаковому предположению о пропорциональности эффективного поля на ядре эффективно-молекулярному полю, возникающему от ближайшего окружения магнитных атомов.

Университет Рурки
Индия

Поступило
5 IV 1972

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ R. Lemaire, R. Pauthenet, J. Schweizer, IEEE. Trans. Magnetics, Mag., 6, 153 (1970). ² S. Blow, J. Phys. Ser. C, 3, 158 (1970). ³ L. M. Levingson, E. Rosenberg et al., J. Appl. Phys., 41, 910 (1970). ⁴ K. H. J. Buschow, J. S. Van Wieringen, Phys. Stat. Sol., 42, 231 (1970). ⁵ B. R. Agarwal, P. H. Кузьмин, Кристаллография, 16, 774 (1971). ⁶ J. Varga, O. I. Bodak et al., Proc. of the Conf. on Mössbauer Spectrometry (Dresden), 2, 1971, p. 377. ⁷ B. R. Агарвал, P. H. Кузьмин, В. И. Черчерников, ibid., p. 681. ⁸ Е. С. Макаров, С. И. Виноградов, Кристаллография, 1, 634 (1956). ⁹ J. W. Florio, N. C. Baenzinger, R. E. Rundle, Acta crystallogr., 9, 367 (1956). ¹⁰ R. E. Watson, A. J. Freeman, Phys. Rev., 123, 2027 (1961). ¹¹ A. J. Freeman, Hyperfine Structure and Nuclear Radiations, Amsterdam, 1968, p. 427. ¹² А. З. Меньшиков, Е. Е. Юрчиков, ЖЭТФ, 63, 1 (7), 190 (1972).