

## ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМАГНИТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ КЮРИ И ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ Но-ЭГЖ (ЭГЖ = Fe, Co) В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

О.К.Кувандиков, Х.О.Шакаров, М.К.Салахитдинова,  
Б.У.Амонов, Ф.Хужаёров (СамГУ)

**Аннотация:** Впервые полуэмпирическое исследовано различных типов косвенного обменного взаимодействия в бинарных системах Но-ЭГЖ (ЭГЖ=Fe,Co), с использованием экспериментальных значения парамагнитных температур Кюри исследуемых образцов в конденсированном состоянии.

Анализом результатов расчетов параметров различных типов косвенного обменного взаимодействий (f-s, d-s, f-d) установлено, что во всех исследуемых соединениях системы Но-Fe и в соединениях системы Но-Co, содержащих более 50 ат.% Co, f-s взаимодействие, а в соединениях Но<sub>3</sub>Co и Но<sub>4</sub>Co<sub>3</sub>, d-s взаимодействие являются самыми сильными и эти взаимодействия играют доминирующую роль в механизме происхождения магнитного порядка в этих соединениях

**Ключевые слова:** обменное взаимодействие, парамагнитная температура, магнитная восприимчивость, магнитный момент, фактор де Жена.

**Аннотация:** Но-ТГМ (ТГМ=Fe,Co) системалари бирикмаларидаги РККИ турдаги алмашинув щзаро таъсири, уларнинг каттиқ ва суюқ ҳолатлари парамагнит Кюри температураларининг ( $\theta_p$ ) тажрибавий кийматларидан фойдаланиб, биринчи марта ярим эмпирик тадқиқ қилинди.

Турли типдлаги (f-s, d-s, f-d) билвосита алмашинув ўзаро таъсир параметрини ҳисоблаш натижаларини таҳлил қилиб, Но-Fe системасидаги барча бирикмаларда ва Но-Co системасидаги Co нинг концентрацияси 50 ат.% дан ортиқ бўлган бирикмаларда f-s ўзаро таъсир, Но<sub>3</sub>Co ва Но<sub>4</sub>Co<sub>3</sub> бирикмаларда эса d-s ўзаро таъсир энг кучли эканлиги аниқланган ва шу ўзаро таъсирлар шу бирикмаларда магнит тартибли ҳолатнинг ҳосил бўлишда ҳал қилувчи рол ўйнайди.

**Калит сўзлар:** алманув, ўзаро таъсир, парамагнит температура, магнит қабул қилувчинлик, магнит момент, де Жен фактори

**Summary:** For the first time we carried out investigation of the exchange interaction of RKKI type in Ho-FGE systems (FGE=Fe, Co) by using the experimental data on paramagnetic temperature of the compounds.

By the analysis of results of calculations of parameters of various types indirect exchange interactions (f-s, d-s, to f-d) are established that in all studied connections of Ho-Fe system and in the compounds of Ho-Co system containing more than 50 at. the % of Co, f-s interaction, and in compounds of Ho<sub>3</sub>Co and Ho<sub>4</sub>Co<sub>3</sub>, d-s interaction are the strongest and these interactions play the dominating role in the mechanism of origin of magnetic order in these compounds.

**Keywords:** exchange interaction, paramagnetic temperature, magnetic susceptibility, magnetic moment, de Gennes factor.

## I. Введение

В переходных металлах, в том числе в редкоземельных металлах (РЗМ), элементах группы железа (ЭГЖ) и их соединениях приобретает особенно важное значение вопрос о происхождении атомного магнитного порядка. В изолированных атомах РЗМ 4f-слоя электронной оболочки заполняется с опозданием, они лежат глубоко и экранированы от внешних влияний слоем  $5s^25p^6$ , даже в конденсированном состоянии. Поэтому, существование прямого обменного взаимодействия между электронами 4f-слоя, ответственное за магнитные свойства РЗМ, почти невозможно. Однако, исследования показывают, что РЗМ и даже соединения на их основе, обладают магнитным упорядочением, обусловленным обменным взаимодействием электронов 4f-слоя, локализованных в узлах кристаллической решётки, через электроны проводимости, называемое косвенным обменным взаимодействием Рудермана – Киттеля – Касуя и Иосиды (РККИ) [f-s-f (или коротко f-s) взаимодействия] [1-4].

Возникает труднее вопрос о происхождении магнитно упорядоченных состояний в ЭГЖ. В атомах ЭГЖ 3d-слоя электронной оболочки заполняется с опозданием. Однако, в отличие от РЗМ, 3d-слой электронной оболочки в атомах ЭГЖ лежит на внешней границе атома и поэтому не так хорошо за экранировано от внешних влияний. Это как будто позволяет говорить о существовании прямого обменного взаимодействия между электронами 3d-слоя, ответственные за магнитные свойства ЭГЖ. Однако, до сих пор не ясно, что может ли эта связь обеспечить наблюдаемое величины температуры Кюри и Нееля ЭГЖ; не выяснено также влияние коллективизации 3d-электронов на характер и величину обменной связи. Таким образом, в случае ионов ЭГЖ приходится больше считаться с влиянием “окружения” на магнитное поведение ионов. При этом оказывается, что спиновая и орбитальная части магнитного момента ведут себя различным образом. Наилучшее совпадение между теорией и опытом получается, если допустить, что орбитальный магнетизм совершенно отсутствует и весь магнетизм обусловлен одними электронными спинами. Это явления называют “замораживанием” электронных орбит (орбитальных моментов) под влиянием электрического поля внутри кристалла [1]. Исходя из выше сказанных следует, что в изучаемых соединениях РЗМ с ЭГЖ вопрос о происхождении магнитного порядка становится ещё труднее. В них возможно существование три типа косвенных обменных взаимодействий [1,5]: f-s-f-между ионами РЗМ (коротко f-s), f-s-d-между ионами РЗМ и ЭГЖ (коротко f-d) и d-s-d-между ионами ЭГЖ (коротко d-s).

Известно [1], что парамагнитная температура Кюри ( $\theta_p$ ) РЗМ, ЭГЖ и их соединений связано с энергетическим параметром  $A \approx k_B \theta_p$ , характеризующего энергию обменного взаимодействия электронов 3d и 4f-слоя. Температурная зависимость парамагнитной восприимчивости этих

объектов непосредственно отражает  $\theta_p$  через закона Кюри Вейсса [ $\chi = C/(T - \theta_p)$ ]. Нами ранее в ряде работ, например, в [6-9] экспериментально было установлено, что зависимости  $\chi(T)$  интерметаллидов в системах Но-(Fe,Co) в конденсированном состоянии описывается законом Кюри-Вейсса и были определены значения  $\theta_p$ .

Цель настоящей работы—изучение влияния магнитных металлов ЭГЖ (ЭГЖ=Fe, Co) на характер взаимодействие типа РККИ в Но и оценка значения параметра  $A$  для всех возможных типов обменных взаимодействий в интерметаллидах бинарных систем Но-(Fe,Co), с использованием экспериментальных значений  $\theta_p$  этих объектов.

## II. Результаты и их обсуждение.

В рамках теории РККИ [1-4], используя представления молекулярного поля, для объяснения экспериментальных значений  $\theta_p$  РЗМ получено следующее выражение [1, 5, 12-13]:

$$\theta_p = \frac{3\pi^2}{k_B \Omega^2 E_F} A_{sf}^2(0) G \sum_{n \neq m} F(2\vec{k}_F |\vec{R}_n - \vec{R}_m|), \quad (1)$$

где  $n$  – число электронов проводимости на атом (ион);  $\Omega$  – атомный объём;  $A_{sf}(0)$ –интеграл s-f- обменного взаимодействия, не зависящая от  $\vec{k}_F$ ;  $E_F$  и  $\vec{k}_F$  – энергия и волновой вектор на поверхности Ферми;  $|\vec{R}_n - \vec{R}_m|$  – расстояния между магнитными ионами, находящиеся в узлах кристаллической решётки  $n$  и  $m$ ;  $F(2\vec{k}_F |\vec{R}_n - \vec{R}_m|) = F(y)$  – функция Рудермана-Киттеля, определяемая выражением

$$F(y) = (y \cos y - \sin y) / y^4; \quad (2)$$

$$G = (g_J - 1)^2 J(J + 1) - \quad (3)$$

– фактор де Жена [13], для РЗМ. В (3)  $g_J$  – фактор Ланде определяется следующим выражением:

$$g_J = 1 + [J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)] / 2J(J + 1), \quad (4)$$

где  $S$ ,  $L$  и  $J$  – соответственно, суммарные значения квантовые числа спинового, орбитального и полного механических моментов электронов 4f-слоя.

В рамках теории РККИ для вычисления интеграла (параметра) косвенного обменного взаимодействия в РЗМ получено следующее выражение [1,5]:

$$A = \frac{9\pi^2}{\Omega^2 E_F} A_{sf}^2(0) \sum_{n \neq m} F(y). \quad (5)$$

Учитывая этого, для полуэмпирическое оценки значения  $A$  для f-s взаимодействие в гольмия, из выражения (1) находим:

$$\frac{A}{k_B} = \frac{3\theta_P}{G_{Ho}} \quad (6)$$

С помощью этой формулы можно тоже оценить значения  $A$  для взаимодействий типа f-d и d-s в изучаемых соединениях основываясь на следующих соображении: 1) Тейлорам [5] сделана попытка описать f-d взаимодействие с помощью модели РККИ. При этом он в место члена  $A_{fd}^2$  (0) в (1) и (5) приписывает произведение интегралов f-d и s-d взаимодействия, т.е.  $A_{fd}(0) \cdot A_{sd}(0)$ ; 2) фактор де Жена для изучаемых соединений можно определить, по правилу аддитивности, следующим выражением:

$$G = (1-x)G_{Ho} + xG_{ЭГЖ}, \quad (7)$$

где  $x$  – содержания ЭГЖ в атомных долях;  $G_{Ho}$  и  $G_{ЭГЖ}$  – факторы де Жена гадолия и ЭГЖ, определяются по (3) следующими выражением [с учетом правила Хунда для  $Ho$  и явление “замораживание” орбитальных моментов для ЭГЖ ( $L=0, J=S, g_J=g_S=2$ )]:

$$G_{Ho} = (g_J - 1)^2 J(J + 1), \quad G_{ЭГЖ} = (g_S - 1)^2 S(S + 1). \quad (8)$$

Учитывая (7) и (8) по (6) можно полуэмпирическое оценить интеграла  $A$  (параметра  $A/k_B$ ) тоже f-d и d-s взаимодействия, в изученных соединениях с помощью следующих выражении:

для d-s взаимодействие ( $G_{Ho}=0$ )

$$A/k_B = \frac{3\theta_P}{xG_{ЭГЖ}}, \quad (9)$$

для f-d взаимодействие ( $G_{Ho} \neq 0, G_{ЭГЖ} \neq 0$ )

$$A/k_B = \frac{3\theta_P}{(1-x)G_{Ho} + xG_{ЭГЖ}} \quad (10)$$

При расчете фактор де Жена по (8) использовали значения  $J$  и  $g_J$  для основного состояния иона  $Ho^{3+}$  ( $J=8, g_J=5/4$ ) и значения  $S$  и  $g_S$  для основных состояний ионов  $Fe^{3+}$  и  $Co^{2+}$  ( $S=7/2$  и  $3/2, g_S=2$ ).

Результаты расчетов приведены в таблице и для наглядности на рис 1, 2. Из таблицы видно, что значения параметра  $A/k_B$  в твердом состоянии больше, чем в жидком состоянии. Анализ таблицы и рис 1., как в зависимости значения  $A/k_B$  от концентрации атомов ЭГЖ показывает, что в системе  $Ho-Fe$  самое сильным является взаимодействие f-s и она усиливается с увеличением содержания атомов  $Fe$ . Взаимодействие d-s лежит между взаимодействиями f-d и f-s. В системе  $Ho-Co$  (рис2), хотя магнитный момент  $Co$  меньше магнитного момента  $Ho$ , тем не менее взаимодействие d-s превосходит по сравнению с взаимодействием f-s в соединениях, содержащих до 50 ат.%  $Co$  ( $Ho_3Co, Ho_4Co_3$ ). В соединениях, содержащих более 50 ат.%  $Co$ , взаимодействие f-s играет доминирующую роль в происхождении их магнитного порядка. В этих соединениях взаимодействи d-s лежит между взаимодействиями f-d и f-s.

Таблица

Значения параметра  $A/k_B$  различных типов взаимодействия с системах  
Ho-ЭГЖ (ЭГЖ=Fe, Co)

Образцы	$A/k_B, 10^2 K$					
	f-s-связь		d-s-связь		f-d-связь	
	твердое сост.	жидкое сост.	твердое сост.	жидкое сост.	твердое сост.	жидкое сост.
Ho	0,60	3,33	-	-	-	-
HoFe <sub>2</sub>	17,879	-3,979	4,528	-1,008	3,615	-0,804
HoFe <sub>3</sub>	26,08	-7,73	4,471	-1,326	3,816	-1,132
Ho <sub>6</sub> Fe <sub>23</sub>	31,82	-7,61	4,272	1,037	3,776	-0,215
Ho <sub>2</sub> Co <sub>17</sub>	58,730	-20,83	3,54	-1,25	3,342	-1,185
$\alpha$ -Fe	-	-	3,610	-	-	-
$\delta$ -Fe	-	-	3,771	1,44	-	-
Ho <sub>3</sub> Co	0,889	2,693	3,200	9,696	0,696	2,108
Ho <sub>4</sub> Co <sub>3</sub>	7,117	7,012	11,386	11,218	3,534	3,482
HoCo <sub>2</sub>	25,454	18,081	15,045	10,086	9,456	6,717
HoCo <sub>3</sub>	34,40	25,547	17,760	10,218	9,828	7,299
Ho <sub>2</sub> Co <sub>7</sub>	40,757	29,061	13,795	9,836	10,306	7,349
HoCo <sub>5</sub>	53,020	55,216	13,031	13,571	10,460	10,894
Ho <sub>2</sub> Co <sub>17</sub>	86,921	87,809	12,237	12,362	10,727	10,836
Co	-	-	11,264	12,384	-	-

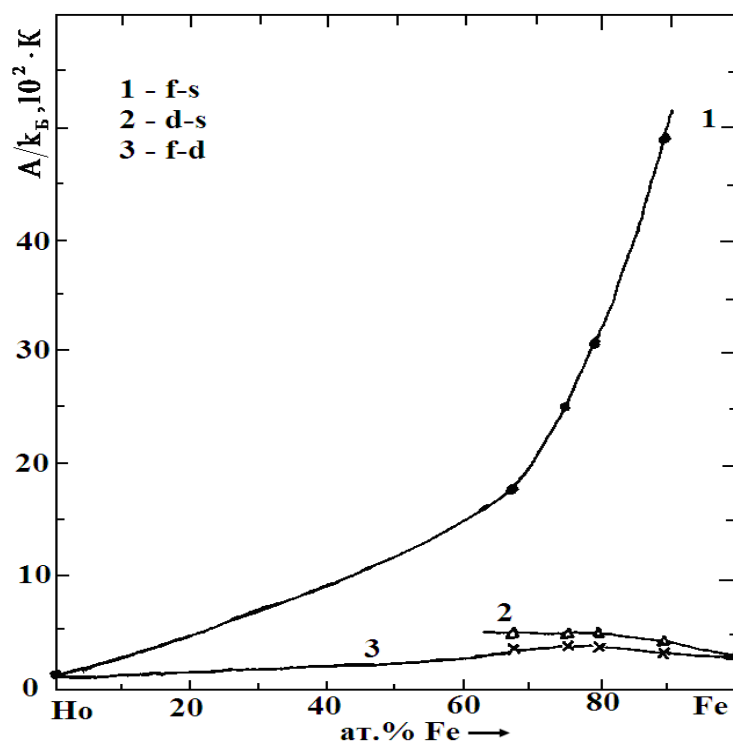


Рис 1. Зависимости  $A/k_B$  от концентрации атомов Fe в системе Ho-Fe

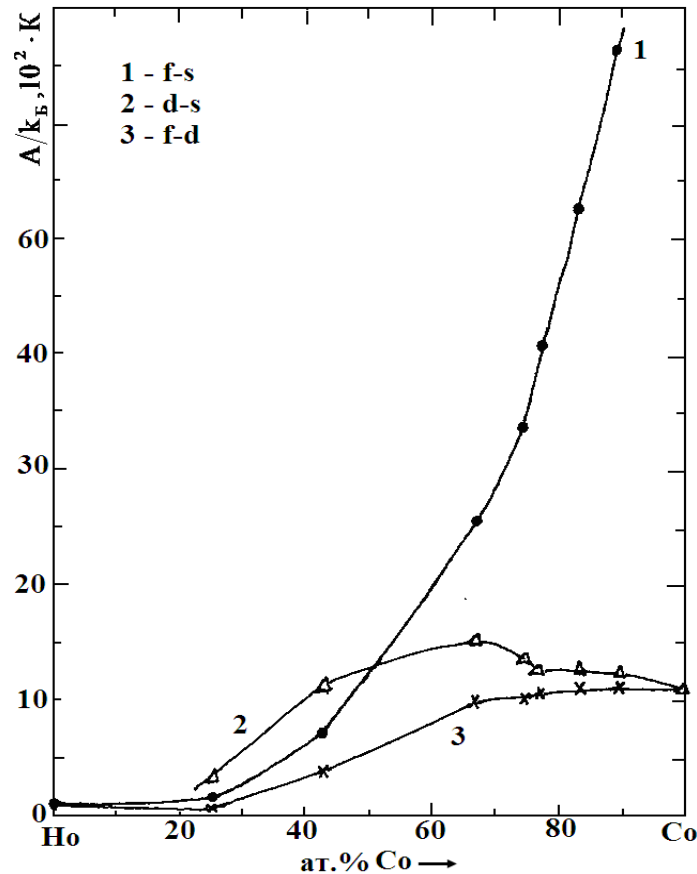


Рис 2. Зависимости  $A/k_B$  от концентрации атомов Co в системе Ho-Co

### III. Выводы

1. Впервые полуэмпирическое исследовано различных типов косвенного обменного взаимодействия в бинарных системах Ho-ЭГЖ (ЭГЖ=Fe,Co), с использованием экспериментальных значения парамагнитных температур Кюри исследуемых образцов в конденсированном состоянии.

2. Установлено, что во всех исследуемых соединениях системы Ho-Fe и в соединениях системы Ho-Co, содержащих более 50 ат.% Co, f-s взаимодействие, а в соединениях  $Ho_3Co$  и  $Ho_4Co_3$ , d-s взаимодействие являются самыми сильными и эти взаимодействия играют доминирующую роль в механизме происхождения магнитного порядка в этих соединениях.

### Литература

1. С. В. Вонсовский. Магнетизм. М.: Наука, 1971. - 1031 с.
2. М. А. Ruderman, С. Kuttel. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments of conduction electrons.//Phys. Rev.-1954. – v.96.-№1.-P.99-102.

3. T. A. Kasuya. Theory of metallic ferro and antiferromagnetism on Zener's model.// Prog. Theor. Phys. (Kyoto). -1956.-V.16.-№1. –P.45-55.
4. K.Iosida. Magnetic properties of Cu-Mn alloys.// Phys. Rev. -1957.-V.106-№.5.-P.893-898
5. К.Тейлор. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов. М.: Мир, 1974. – 221 с.
6. Кувандиков О.К., Салахитдинова М.К., Шакаров Х.О. Магнитные свойства интерметаллических соединений гольмия с кобальтом в твердом и жидком состояниях// Узб. физ. журнал.-Тошкент, 1996.- №5, 6- с. 45-48.
7. Кувандиков О.К., Шакаров Х.О., Салахитдинова М.К. Магнитная восприимчивость соединений гольмия с элементами группы железа при высоких температурах// Известия вузов.Физика,-г.Томск, 1997.- №6.- с.105-107.
8. Кувандиков О.К., Шакаров Х.О., Салахитдинова М.К. Магнитные свойства интерметаллических соединений. РЗМ (Gd,Ho) с ПМ (Fe,Co,Ni) в твердом и жидком состояниях// Узб. физ.журн.- г.Ташкент, 1998.- №5.- с.53-63.
9. Кувандиков О.К., Шакаров Х.О., Салахитдинова М.К. Парамагнитные свойства интерметаллидов в системе Ho-Co в твердом и жидком состояниях// Расплавы. РАН.-г.Москва, 1999.- с.46-50.
- 10.Kuvandikov O.K., Shakarov X.O., Salakhitdinova M.K. Magnetic properties of intermetallics of REM-TM systems of high temperatures//. Uzbek journal of Physics.-2001.-№3.-№.1-2.,- PP.67-74.
- 11.Kuvandikov O. K., Shakarov X.O., Sayfullaeva D. A., Salakhitdinova M. K. Investigations of magnetic properties of compounds of rare-earth metals with metals of the iron Group in the range of the solid-liquid phase transition//. The Physics of Metals and Metallography. 2002.-Vol. 93.- Suppl.1- pp.548-553.
- 12.Y. A. Rocher. Emploi des niveaux lies virtuels dans les metaux de terres rares.//Phys. Chem. Sol.-1962.-V.247.-1621-1629.
- 13.G.de Gennes. Sur les propriétés des metaux de terres rares //Compt. Rend. - 1958. –V.247. –P.1836-1838.