

АНОМАЛЬНОЕ УВЕЛИЧЕНИЕ СВЕРХТОНКОГО ПОЛЯ НА ЯДРАХ ГАДОЛИНИЯ ПРИ РАЗБАВЛЕНИИ ЕГО ПОДРЕШЕТКИ НЕМАГНИТНЫМ ЛЮТЕЦИЕМ В СОЕДИНЕНИЯХ $Gd_{1-x}Lu_xFe_2$

А.К.Куприянов, Н.Ю.Иванова, Д.А.Куприянов, Л.В.Ухова

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 ноября 1992 г.

С помощью ЯМР обнаружено аномальное возрастание сверхтонкого поля на ядрах гадолиния в соединениях $Gd_{1-x}Lu_xFe_2$ при разбавлении РЗ-подрешетки немагнитным лютецием. Предполагается, что наблюдаемое увеличение обусловлено явлением межзонного смешивания.

При изучении распределения спиновой плотности методом ЯМР в соединениях $Gd_{1-x}Lu_xFe_2$ нами обнаружено аномальное увеличение сверхтонкого поля на ядрах гадолиния при разбавлении его подрешетки немагнитными атомами лютеция.

Образцы сплавов при $0 \leq x \leq 0,5$ выплавлялись в дуговой электропечи по стандартной технологии с последующим фазовым анализом, результаты которого позволяют утверждать, что полученные составы обладали структурой С15. Спектры ЯМР ^{155}Gd и ^{157}Gd получались на спектрометре некогерентного спинового эха при температуре 77 К.

Значение резонансных частот положение центра тяжести спектров ЯМР для двух изотопов гадолиния в соединениях $Gd_{1-x}Lu_xFe_2$

Соединение	частота, МГц	
	^{155}Gd	^{157}Gd
$GdFe_2$	56,6	74,3
$Gd_{0,9}Lu_{0,1}Fe_2$	57,2	75,0
$Gd_{0,8}Lu_{0,2}Fe_2$	57,4	75,4
$Gd_{0,7}Lu_{0,3}Fe_2$	57,8	75,8
$Gd_{0,6}Lu_{0,4}Fe_2$	58,1	76,3
$Gd_{0,5}Lu_{0,5}Fe_2$	58,3	76,5

В таблице указаны значения частот, соответствующих положению центра тяжести изученных спектров ЯМР, Gd, откуда видно, что по мере разбавления Gd-подрешетки лютецием частота ^{155}Gd монотонно увеличивается от 56,6 для $GdFe_2$ до 58,3 МГц в соединении $Gd_{0,5}Lu_{0,5}Fe_2$ и от 74,3 до 76,5 МГц для изотопа ^{157}Gd . Такое увеличение тем более удивительно потому, что в аналогичных соединениях $Gd_{1-x}Y_xFe_2$ ранее наблюдалась обратная тенденция: сверхтонкое поле на гадолинии уменьшалось с ростом концентрации иттрия как следствие ослабления обменного взаимодействия в Gd-подрешетке ¹.

Для выяснения причин противоположного влияния немагнитных ионов Lu и Y на величину сверхтонкого поля H_{cm}^{Gd} необходимо обратиться к его разложению на отдельные вклады, один из которых обусловлен раскомпенсацией s-оболочек атома Gd его собственным магнитным моментом, а два других сопоставлены и связаны с поляризацией электронов проводимости соседними

атомами из Gd- и Fe-подрешеток. Последний вклад имеет превалирующее значение так, что суммарное сверхтонкое поле на ядрах Gd оказывается коллинеарным его магнитному моменту. Очевидно, что при замещении гадолиния немагнитными атомами могут изменяться оба последних вклада. Уменьшение вклада Fe-подрешетки происходит вследствие уменьшения магнитного момента железа μ_{Fe} при переходе от $GdFe_2$ к $LuFe_2$ или YFe_2 , но такое уменьшение μ_{Fe} более заметно для составов с иттрием и не может служить объяснением наблюдаемому росту H_{cm}^{Gd} . Введение в Gd-подрешетку немагнитных атомов также должно способствовать некоторому падению сверхтонкого поля. В количественном отношении индуцированные сверхтонкие поля обычно описываются на основе РККИ-приближения теории косвенного обмена. Результаты наших измерений демонстрируют прежде всего недостаточность этого приближения и необходимость учета электронов d -типа ^{2,3}.

Обращаясь к различию электронной структуры атомов Y и Lu нетрудно заметить, что первый из них обладает валентными $5s^2$ - и $4d^1$ -электронами, а Lu — $6s^2$ и $5d^1$ -электронами в точности соответствующим структуре валентных электронов гадолиния. Таким образом противоположное влияние иттрия и лутеция на сверхтонкие поля на ядрах Gd можно связать с энергетическим различием d -электронов немагнитных атомов, которые примешиваются к $5d$ -плотности атомов гадолиния.

Вообще говоря, возникновение дополнительной спиновой d -плотности вблизи атома Gd может приводить к различным эффектам: сверхтонкое поле либо увеличивается, либо уменьшается в зависимости от направления возникающей поляризации. Если d -поляризация параллельна магнитному моменту атома Gd, то ее вклад в сверхтонкое поле оказывается отрицательным так, что для общего возрастания поля по мере увеличения содержания лутеция необходимо предположить уменьшение этого вклада. Если же поляризация d -электронов отрицательна по отношению к магнитному моменту, то для наблюдающегося увеличения H_{cm}^{Gd} требуется увеличение d -поляризации.

Измерения сверхтонких полей под действием всестороннего сжатия ⁴ показывают, что имеет место последнее предположение. Возникновение отрицательной $5d$ -поляризации в этом случае связывается с явлением $4f-5d$ -смешивания благодаря виртуальным переходам между $4f$ - и $5d$ -уровнями гадолиния. Аналогично вычислениям Кондо ⁵ можно показать, что плотность вероятности виртуальных переходов определяется выражением вида:

$$w^{\pm} = \frac{1}{|E_{5d} - E_{\pm}|} \langle \psi'_{4f} V_{fd} \psi_{5d} \rangle \langle \psi_{5d} V_{fd} \psi_{4f} \rangle, \quad (1)$$

где ψ_{4f} и ψ'_{4f} — волновые функции $4f$ -электронов в основном и возмущенном состояниях, ψ_{5d} — функция $5d$ -электронов, E_{5d} и E_{\pm} — энергии $5d$ - и $4f$ -электронов с разными направлениями спинов соответственно, а V_{fd} представляет собой матричный элемент $f-d$ -взаимодействия.

Вследствие того, что заряд ядра гадолиния меньше, чем у ядра лутеция, $5d$ -уровни последнего оказываются ближе к уровням $4f$ -электронов. Разбавление подрешетки гадолиния лутецием приводит к образованию "примесного" $5d$ -уровня, более близкого к $4f$ -состояниям, и, как следствие этого, уменьшению знаменателя в выражении (1), то есть к увеличению $5d$ -плотности в окрестности атомов гадолиния. Для иттрия же картина обратная — его заряд меньше, чем у гадолиния, и его примесный уровень выше в структуре полос, приводя к падению d -вклада.

Альтернативной причиной возрастания сверхтонкого поля могло бы служить уменьшение $5d$ -спиновой плотности, параллельной магнитному моменту атома гадолиния. Возникновение плотности такого направления следует из расчетов зонной структуры фаз Лавеса ⁶, где падение величины $5d$ -момента обусловлено уменьшением ковалентного $3d - 5d$ -смешивания. В этом случае степень смешивания оказывается обратно пропорциональной различию энергий центров $3d$ - и $5(4)d$ -полос ⁷, причем у соединений с иттрием $4d$ -полоса расположена ближе к $3d$ -зоне, чем $5d$ -полоса лутеция ^{6,7}. Поэтому, если бы такой механизм индуцирования $5d$ -плотности действительно имел место, то он более отчетливо проявлялся бы в соединениях $Gd_{1-x}Y_xFe_2$, что противоречит результатам эксперимента ¹. Таким образом представляется более правильным считать, что наблюдаемое увеличение сверхтонкого поля на ядрах Gd в соединениях $Gd_{1-x}Lu_xFe_2$ обусловлено изменением величины межзонного $4d - 5d$ -смешивания.

-
1. В.А.Васильковский, Н.М.Ковтун, А.К.Куприянов и др., ЖЭТФ **65**, 693 (1973).
 2. D.Davidow, Sol. St. Com. **12**, 621 (1973).
 3. В.Н.Нармон, А.Д.Фриман, Phys. Rev. B **10**, 1979 (1974).
 4. А.К.Куприянов, В.А.Васильковский, Вест. МГУ, сер. физ. **27**, N3, 49 (1986).
 5. J.Kondo, Prog. Theor. Phys. **28**, 846 (1962).
 6. Н.Ямада, Physica B **149**, 390 (1988).
 7. M.S.Brooks, O.Eriksson, B.Johansson, J. Phys. Condens. Mat. **1**, 5861 (1989).