

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ УРОВНЕЙ В СПИНОВЫХ ПОДЗОНАХ ФЕРРОМАГНИТНОГО КОБАЛЬТА С ПОМОЩЬЮ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

*Л.И.Винокурова, А.Г.Гапотченко, Е.С.Ицкевич,
Э.Т.Кулатов*

В ферромагнитном ГПУ кобальте методом де Гааза — ван Альфена измерена барическая производная (БП) частоты α . Показано, что по величине БП сечений поверхности Ферми можно определять положение порождающих их уровней в зонной структуре ферромагнетика.

Из трех ферромагнитных $3d$ -металлов наименее изученным является кобальт и число работ, посвященных его электронной структуре, намного меньше чем для Ni и Fe. В экспериментальном плане это объясняется прежде всего трудностью получения совершенных кристаллов, а в теоретическом — сложным видом его зонной структуры. Поэтому только сравнительно недавно появились работы, где с помощью эффекта де Гааза — ван Альфена (ДГВА) были получены некоторые экстремальные сечения поверхности Ферми (ПФ) [1, 2], позволившие проверить имеющиеся немногочисленные расчеты ферромагнитного ГПУ кобальта [3 — 5].

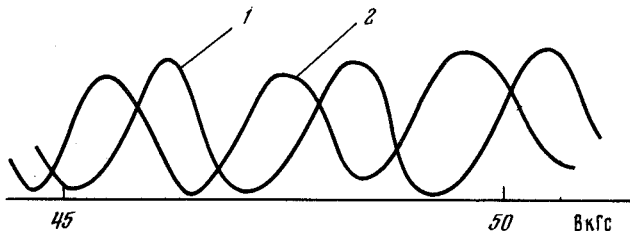
Общим пунктом в имеющихся моделях зонной структуры кобальта является то, что Co, как и Ni, считается сильным ферромагнетиком, т.е. в спин-поляризованных зонах с большим числом заполнения (ЗБЗ) d -зоны находятся ниже уровня Ферми и целиком заполнены. ПФ для ЗБЗ состоит из одной [4], или двух [5] электронных поверхностей. Разногласия между моделями состоят также в том, имеется ли шейка в точке Γ зоны Бриллюэна, которой можно приписать частоту β , и существуют ли на этой поверхности открытые траектории вдоль направления [0001]. Условие существования такой шейки $E_F > E_{\Gamma_5^-}$ [5]. Для зоны с меньшим числом заполнения (ЗМЗ) уровень Ферми проходит через сложную систему d -уровней и ПФ этой спиновой зоны имеет много листов, величина и положение которых критичны к выбору потенциала.

Ограниченность экспериментальной информации (измерены только некоторые небольшие сечения ПФ), отсутствие кристаллов, позволивших бы наблюдать большие сечения, значительное расхождение в моделях зонной структуры побуждают использовать давление как параметр, могущий оказать различное воздействие на сечения ПФ для разных моделей и, таким образом, сделать выбор в пользу одной из них.

Мы измеряли эффект ДГВА под давлением до 11 кбар. Давление создавалось в камере фиксированного давления [6], использовалась модуляционная методика измерений эффекта ДГВА, как и при изучении Ni и Fe [7, 8]. Образцы имели вид параллелепипедов с размера-

ми $1 \times 1 \times 4 \text{ мм}^3$. Внутреннее поле было оценено равным $12,6 \text{ кГс}$. Из-за недостаточного совершенства имевшегося у нас кристалла ($\rho(300 \text{ K})/\rho(4,2 \text{ K}) \approx 150$) можно было наблюдать только низшую частоту α ($F_\alpha = 1,06 \text{ мГс}$) и небольшое число осцилляций. Поэтому для обеспечения достаточной точности, БП была определена методом фазового сдвига, используемого при генерации давления жидким или твердым гелием.

На рисунке показано смещение по фазе на $\Delta\theta$ участков осцилляционных кривых, относящихся к давлениям $1,5$ и 11 кбар . БП вычислялась по формуле $d \ln S / dP = (B/F) (\Delta\theta / \Delta P 2\pi)$ и оказалась равна $(-1,4 \pm 0,3) \cdot 10^{-3} \text{ кбар}^{-1}$.



Участки осцилляционных кривых, смещенных по фазе давлением. Кривая 1 — давление $1,5 \text{ кбар}$, кривая 2 — 11 кбар

В работах [8, 9] были сделаны оценки БП, обусловленных перераспределением электронов между зонами, где уменьшение намагниченности M объяснялось в рамках теории Стонера, как уменьшение обменного расщепления ΔE между спиновыми зонами, т.е. было принято, что $\delta \Delta E / \Delta E = \delta M / M$.

Однако, если в вычислениях использовать не экспериментальную эффективную массу, а зонную, полученную из расчетов, что более корректно для этой модели, то оценка, основанная на теории Стонера, дает заниженную по сравнению с экспериментом величину. Поэтому, необходимо иметь формулу для БП, не использующую параметра ΔE , связь которого с M может иметь различный характер для сильных и слабых ферромагнетиков [10].

Считая, что изменение величины магнитного момента под давлением определяется перетеканием электронов из ЗБЗ в ЗМЗ, сопровождаемым изменением объемов частей ПФ, из простых соображений получаем

$$\frac{d \ln S}{dP} = - \frac{m^*}{2e\hbar S} \frac{M}{N_\sigma \mu_B} \frac{d \ln M}{dP} \quad (1)$$

где S — площадь экстремального сечения, M — атомный магнитный момент, μ_B — магнетон Бора, N_σ — плотность состояний в спиновой зоне на уровне Ферми, m^* — эффективная зонная масса.

Согласно [12] $d \ln M / dP = -3,1 \cdot 10^{-4} \text{ кбар}^{-1}$. N_σ для ЗМЗ взято равным $15,3$, а для ЗБЗ равным $1,9 \text{ эл/ат.ридб.}$ [4а]. Зонная масса m^* вы-

числена из экспериментальной $m^* = 0,11m_0$ [2], причем для ЗМЗ константа многочастичного увеличения массы λ была вычислена нами равной 0,45, согласно оценкам в [5]. Отрицательный знак экспериментальной БП говорит о том, что, согласно (1), данная поверхность является дырочной в ЗМЗ или электронной в ЗБЗ. Вычисленная по (1) для измеренной нами частоты α БП (α) равна: $-11,3 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$ для ЗБЗ, $-1,4 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$ для ЗМЗ. Оцененное значение БП (α) для ЗМЗ хорошо согласуется с нашими экспериментальными данными и подтверждает общепринятое мнение, что сечение α находится в этой зоне.

Этот метод оценки БП был использован нами также для другой частоты $-F_\beta$, равной 3,53 мГц, единственной до сих пор, БП которой измерена в [11] и равна $-2,2 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$. В работе [12] приводятся соображения, согласно которым сечение β относится к дырочной поверхности в ЗМЗ.

В работе [9] обсуждался вопрос о вкладах различного происхождения в суммарную БП сечений ПФ ферромагнетика: о вкладе, обусловленном магнитным перетеканием и вкладе, связанном с изменением кристаллического потенциала. Первый вычисляется по формуле (1), или по подобной формуле (1), как это делается в [8], второй определяется из экспериментальных данных по "модульному" металлу. Учитывая топологическую эквивалентность ГПУ и ГЦК решеток, для предполагаемой шейки β в зоне ЗБЗ Со можно взять потенциальную часть БП, такую же, как у шейки меди, равную $+1,8 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$. Вычисленная по (1) БП (β) равна: $-3,6 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$ для ЗБЗ и $-0,4 \cdot 10^{-3}$ кбар $^{-1}$ для ЗМЗ. Согласно [5] m^* взята равной 0,1 m_0 . Тогда результирующая БП (β) равна $-1,8 \cdot 10^{-3}$ для ЗБЗ, $+1,3 \cdot 10^{-3}$ для ЗМЗ.

Таким образом экспериментальные значения барических производных сечений ПФ позволяют сделать заключение, что сечение α принадлежит дырочной поверхности и находится в ЗМЗ, сечение β принадлежит электронной поверхности в ЗБЗ и, следовательно, в зонной структуре ГПУ Со выполняется $E_F > E_{\Gamma_5^-}$ и поверхность ЗБЗ имеет открытые траектории вдоль [0001].

Институт
физики высоких давлений
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 мая 1979 г.

Литература

- [1] J.R.Anderson, J.J.Hudak, D.R.Stone, AIP Cond. Proc., 10, 46, 1973; I.Rosenman, F.Battalan. Phys. Rev., B5, 1340, 1972.
- [2] K.Maczawa, M.Takahashi, Y.Saito. J.Phys. Soc., Japan, 45, 869, 1978.
- [3] S.Wakoh, J.Yamashita. J. Phys. Soc. Japan, 28, 1951, 1970; S.Ishide, J. Phys. Soc. Japan, 33, 369, 1972.
- [4] C.M.Singal, T.P.Das. Phys. Rev., B16, 5068, 1977; J.D.Connolly, Intern. J. Quantum Chem., 11, 257, 1968.
- [5] F.Battalan, I.Rosenman, C.B.Sommers. Phys. Rev., B11, 545, 1975.
- [6] Е.С.Ицкевич. ПТЭ, №4, 148, 1963.

- [7] Л.И.Винокурова, А.Г.Гапотченко, Е.С.Ицкевич. Письма в ЖЭТФ, 26, 443, 1977.
- [8] Л.И.Винокурова, А.Г.Гапотченко, Е.С.Ицкевич. Письма в ЖЭТФ, 28, 280, 1978.
- [9] Л.И.Винокурова, А.Г.Гапотченко, Е.С.Ицкевич, Э.Т.Кулатов. Н.И.Куликов. ЖЭТФ, 76, №5, 1979 (в печати).
- [10] K.J.Duff, T.P.Das. Phys. Rev., B3, 192, 1971.
- [11] J.R.Anderson, T.T.Hudak, D.R.Stone, J.E.Schirber, Proc. Intern. Conf. Magnet., ICM-73, Moscow, III, 344, 1974.
- [12] J.R.Anderson. High-Pressure and Low-Temperature Physics, edited by C.W.Chu and Wollam (Plenum Publishing Corporation, 1978).
-