Письма в ЖЭТФ, том 76, вып. 4, с. 251 – 253

Изменение магнитной структуры $FeBO_3$ при высоких давлениях

В. П. Глазков, С. Е. Кичанов[*1)], *Д. П. Козленко**, *Б. Н. Савенко**, *В. А. Соменков*

Российский научный центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия

* *Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

Поступила в редакцию 5 июля 2002 г.

Методом нейтронной дифракции исследованы изменения в магнитной структуре бората железа $FeBO_3$ в условиях воздействия гидростатического и квазигидростатического давления до 4 ГПа. В квазигидростатических условиях наблюдалось изменение ориентации магнитных моментов атомов железа при давлении $P \geq 1.4$ ГПа. В гидростатических условиях при давлениях до 2.1 ГПа изменений в магнитной структуре бората железа не обнаружено. Такое поведение связано с влиянием неоднородности упругих напряжений (по величине и направлению) на конфигурацию магнитных подрешеток.

PACS: 61.12.Ld, 62.50.+p, 75.25.+z

Исследования структуры и магнитных свойств бората железа $FeBO_3$ представляют интерес в связи с магнитными фазовыми переходами, происходящими при изменении температуры и давления [1 – 8]. В нормальных условиях $FeBO_3$ имеет ромбоэдрическую структуру, магнитные моменты ионов железа в которой ориентированы перпендикулярно кристаллографической оси (111) и почти антипараллельны. Угол между ними имеет величину $\beta \sim 0.9°$, и образующийся слабый ферромагнитный момент лежит в базисной плоскости [2].

Возрождение интереса к ромбоэдрическим антиферромагнетикам связано с существенными методическими достижениями в области исследования твердого тела при высоких давлениях с помощью нейтронного и синхротронного излучения.

Ранее методом нейтронной дифракции исследовались изменения магнитной структуры бората железа под давлением [3, 4]. Было установлено, что при давлении $P \sim 1.7$ ГПа наблюдается спин-переориентационный фазовый переход, предсказанный в [5], приводящий к изменению угла φ между векторами магнитных моментов ионов Fe и кристаллографической осью (111). Однако в последующих исследованиях монокристаллов $FeBO_3$ в условиях гидростатического давления методом мессбауэровской спектроскопии на синхротронном излучении подобный фазовый переход не наблюдался. При более высоких давлениях ($P \sim 44$ ГПа) и комнатной температуре в $FeBO_3$ наблюдали переход из антиферромагнитного состояния в немагнитное [6], а при дальнейшем увеличении давления (до $P \sim 53$ ГПа) был обнаружен изоструктурный фазовый переход, который сопровождался скачкообразным изменением объема элементарной ячейки [7]. Таким образом, возникло явное противоречие между данными нейтронных и мессбауэровских исследований и цель настоящей работы состояла в выяснении возможных причин этого.

Согласно [8], существенное влияние на точку спин-переориентационного фазового перехода в слабых ферромагнетиках может оказывать неоднородность распределения внутренних напряжений в исследуемом образце. Поэтому в настоящей работе мы исследовали влияние высокого давления на магнитную структуру $FeBO_3$ в гидростатических и квазигидростатических условиях проведения эксперимента.

Эксперименты выполнены на спектрометре ДН-12 на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 в Объединенном институте ядерных исследований (Дубна). Поликристаллические образцы $FeBO_3$ объемом около 2.5 мм^3 помещали в камеру высокого давления с сапфировыми наковальнями [9]. Для создания гидростатических условий использовали специальную жидкость "Флюоринерт". В квазигидростатических условиях (без дополнительной передающей среды) эксперименты проводили при давлениях до 4 ГПа, в гидростатических условиях – до 2.1 ГПа, выше которых происходит кристаллизация "Флюоринерта", а следовательно, частичное нарушение гидростатических условий эксперимента. Давление в камере определяли по сдвигу линий люминесценции рубина с точностью до 0.05 ГПа. Время измерения одного спектра составляло в среднем около 20 ч. Обработку экспериментальных

[1)] e-mail:ekich@nf.jinr.ru

данных производили с помощью программ “MRIA” [10] и “Fullprof” [11], основанных на стандартном методе Ритвельда [12]. При обработке полученных дифракционных спектров уточняли параметры ромбоэдрической ячейки в гексагональной установке a и c, позиционный параметр атомов кислорода x, величину магнитного момента атомов железа M и угол φ между кристаллографической осью (111) и векторами магнитного момента атомов железа. Уточнение проводили в рамках известных моделей (пространственная группа $R\bar{3}c$) [1, 2].

Как видно из дифракционных спектров $FeBO_3$, представленных на рис.1, с увеличением давления наблюдается уменьшение интенсивности магнитно-

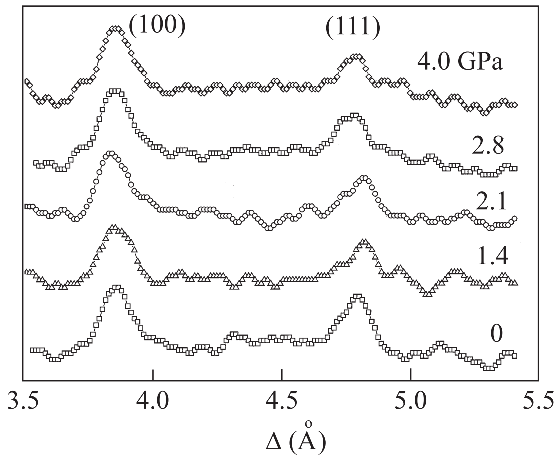

Рис.1. Участки дифракционных спектров $FeBO_3$, измеренные при давлениях 0, 1.4, 2.0, 2.8 и 4.0 ГПа, нормированные на эффективный поток нейтронов. Угол рассеяния $2\theta = 45.5^\circ$

го пика (111), при этом интенсивность магнитного пика (100) практически не изменяется. Данный эффект указывает на изменение ориентации магнитных моментов атомов железа относительно кристаллографической оси (111). Нельзя исключить в принципе и объяснение на основе двухфазной модели для бората железа $FeBO_3$ под давлением. С увеличением давления объем образца со слабым ферромагнетизмом уменьшается, а объем чисто антиферромагнитной фазы увеличивается. В условиях гидростатического давления изменение интенсивности магнитного пика (111) существенно меньше.

На рис.2 показана зависимость угла φ между вектором магнитного момента и кристаллографической осью (111). В гидростатических условиях эксперимента угол φ меняется незначительно, в то время как в квазигидростатических условиях он уменьшается с 90° до 42° с ростом давления до 4.0 ГПа. Зависимость

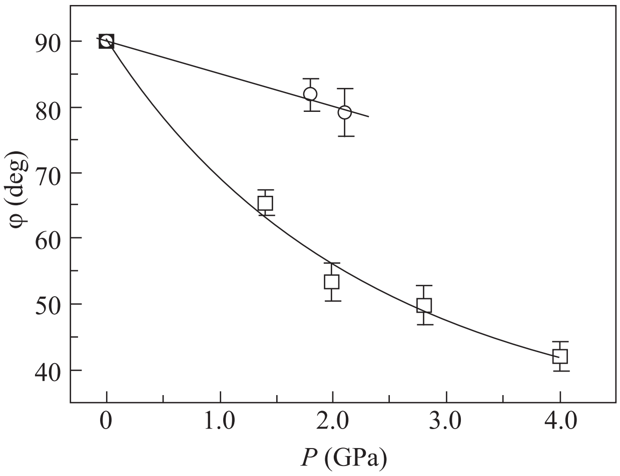

Рис.2. Зависимость угла φ – между магнитными моментами ионов железа и кристаллографической осью (111) – от давления

параметров решетки a и c гексагональной решетки от давления представлена на рис.3. При увеличении

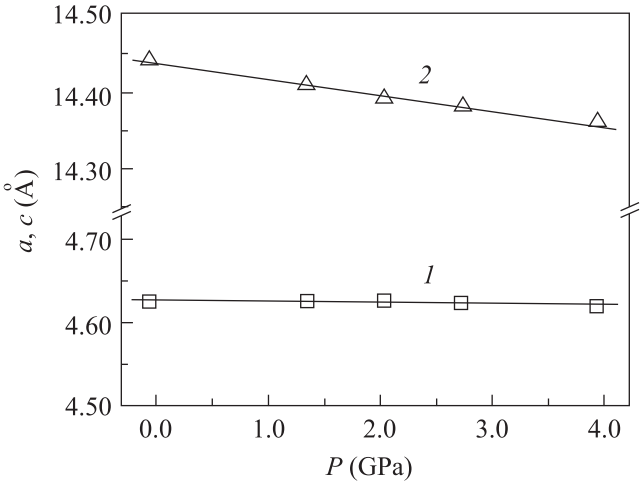

Рис.3. Зависимость параметров гексагональной ячейки a (*1*) и c (*2*) от давления. Сплошные линии – линейная экстраполяция экспериментальных данных. Погрешности экспериментальных точек не превосходят размеров символов

давления отношение c/a уменьшается с 3.123(5) до 3.110(5).

Магнитная структура бората железа имеет две магнитные подрешетки атомов Fe с противоположно направленными магнитными моментами. Согласно [2], термодинамический потенциал в этом случае можно представить в виде

$$\Phi = \Phi_m + \Phi_{ml} + \Phi_l + \Phi_{st}. \quad (1)$$

Здесь Φ_{ml} – энергия магнитоупругого взаимодействия, Φ_l – упругая энергия, Φ_{st} – энергия внешних напряжений.

При наложении на поликристаллический образец внешнего давления выражение для энергии внешних напряжений примет вид

$$\Phi_{st} = P \sum_{(i)} U_{ii} + \sum_{(i,j)} \sigma_{ij} U_{ij}, \qquad (2)$$

где σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, U_{ij} – компоненты тензора деформаций.

Выражение (2) указывает на то, что конфигурация магнитных моментов подрешеток в случае поликристаллического образца и квазигидростатического давления является функцией не только давления P, но и внешних упругих напряжений σ_{ik} [8]. Причем, вызываемые напряжениями изменения могут быть весьма значительными благодаря усиливающему действию обменных сил [5]. Поэтому наблюдавшийся в [3,4] спин-переориентационный фазовый переход можно трактовать как индуцированное внешними упругими напряжениями изменение конфигураций магнитных подрешеток.

В случае, когда образец является монокристаллом, в [13] предсказан эффект "выключения" поля внешнего давления для ромбоэдрических антиферромагнетиков, заключающийся в том, что при приложении внешнего давления параллельно оси z (как в [6]) магнитная система не чувствует внешнего давления, независимо от его абсолютной величины, а при приложении давления в перпендикулярном направлении (вдоль оси y) давление спин-переориентационного перехода становится минимальным, составляя 0.2 и 0.6 ГПа для Fe_2O_3 и $FeBO_3$, соответственно. Это означает, что отсутствие перехода в монокристальных мессбауэровских экспериментах и наличие его в поликристальных нейтронных экспериментах можно считать экспериментальным подтверждением предсказанного в [13] эффекта. Что касается переходов при более высоких давлениях (до 50 ГПа), при которых создание чисто гидростатических условий практически невозможно, то и в этом случае влияние упругих напряжений на конфигурацию магнитных подрешеток может оказаться существенным. Возможно, именно с этим обстоятельством связано различие между экспериментальными (53 ГПа) и расчетными (23 ГПа) значениями давления перехода в $FeBO_3$ при высоких давлениях [14].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 00-02-17077 и Министерства промышленности, науки и технологий РФ, госконтракт # 40.012.1.1.1148 и грант поддержки уникальных установок России.

1. R. Diehl, W. Jantz, B.I. Noland et. al., *Growth and properties of iron borate $FeBO_3$*, in: Current Topics in Matter. Science, Ed. E. Kaldis, Elsevier Science Pub. **11**, 241 (1984).
2. I. E. Dzialoshinski, Sov. Phys. JETP **5**, 1259 (1957).
3. В. П. Глазков, В. В. Квардаков, В. А. Соменков, Письма в ЖЭТФ **71**, 238 (2000).
4. V. P. Glazkov, V. V. Kvardakov, and V. A. Somenkov, High Press. Res. **17**, 6 (2000).
5. А. С. Пахомов, Физика металлов и металловедение **25**, 5 (1968).
6. И. А. Троян, А. Г. Гаврилюк, В. А. Саркисян и др., Письма в ЖЭТФ **74**, 26 (2001).
7. A. G. Gavriliuk, I. A. Trojan, R. Boehler et al., Письма в ЖЭТФ **75**, 25 (2002).
8. П. П. Максименков, В. И. Ожогин, ЖЭТФ **65**, 657 (1973).
9. В. П. Глазков, И. Н. Гончаренко, Физика и техника высоких давлений **1**, 181 (1991).
10. J. Rodrigues-Carvajal, Phys. **B192**, 55 (1993).
11. V. B. Zlokazov, Comput. Phys. Commun. **b5**, 415 (1995).
12. H. M. Rietveld, Appl. Cristallogr. **2**, 65 (1969).
13. В. И. Ожогин, Р. М. Фарзетдинова, Препринт ИАЭ №3624, М., 1987.
14. K. Parlinski, Eur. Phys. J. **B27**, 283 (2002).