

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДФИЦ РАН
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

СБОРНИК ТРУДОВ

ХІІІ международного семинара
17 сентября 2019 г., Махачкала

*Семинар проводится при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования РФ*

Махачкала 2019

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

**Сборник трудов XIII международного семинара
17 сентября 2019 г., Махачкала**

В настоящий сборник включены материалы, представленные на XIII международный семинар "Магнитные фазовые переходы".

Семинар проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2019.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели: Хизриев К.Ш., Махачкала, Россия
Алисултанов З.З., Махачкала, Россия

Зам. председателя: Арсланов Т.Р., Махачкала, Россия
Соколовский В.В., Челябинск, Россия

Секретарь: Курбанова Д.Р., Махачкала, Россия

Члены оргкомитета

чл.-корр. РАН Борисов А.Б., Екатеринбург, Россия
Алиев А.М., Махачкала, Россия
Аплеснин С.С., Красноярск, Россия
Батдалов А.Б., Махачкала, Россия
Грановский А.Б., Москва, Россия
Екомасов Е.Г., Уфа, Россия
Кассан-Оглы Ф.А., Екатеринбург, Россия
Котов Л.Н., Сыктывкар, Россия
Мокшин А.В., Казань, Россия
Перов С.Н., Москва, Россия
Прудников В.В., Омск, Россия
Прошин Ю.Н., Казань, Россия
Смирнов А.И., Москва, Россия
Соколов А.И., С.-Петербург, Россия
Таскаев С.В., Челябинск, Россия

ЛОКАЛЬНЫЙ И ПРОГРАММНЫЙ ОРГКОМИТЕТ

Хизриев К.Ш. – председатель	Бадиев М.К.
Гамзатов А.Г. – зам. председателя	Ибаев Ж.Г.
Абакарова Н.С. – секретарь	Магомедов М.А.
Абуев Я.К.	Мутайламов В.А.
Амиров А.А.	Рамазанов М.-Ш.К.
Атаева Г.Я.	Тааев Т.А.
Бааев А.Б.	

Содержание

Секция А2. Магнитные фазовые переходы.....	5
Авторский список.....	69

Секция А2

Магнитные фазовые переходы

Скачкообразные процессы магнитного разупорядочения, стимулированные магнитным полем в системах со структурной неустойчивостью

В.И.Вальков¹, А.В.Головчан¹, В.И. Колецов², Б.М. Тодрис¹, В.И. Митюк³

¹ГУ Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, ДНР

e-mail: valkov09@gmail.com

²Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН, Москва, Россия

³ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению" Минск, Беларусь

Аномальное расщепление обратной парамагнитной восприимчивости $\chi(T)^{-1}$ в полугейслеровых сплавах $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ (Рис.1), обнаруженное в области температур ($T = T_{i2} > T = T_{i1}$) структурного перехода первого рода. $PM(P6_3/mmc-hex) \leftrightarrow PM(Pnma-orth)$ (Рис.2) было предсказано на основе модели магнитоструктурных переходов в [1]. Эта модель исходила из предположения, что поскольку обе парамагнитные температуры Кюри - положительны и $\theta_{orth} > \theta_{hex} > 0$, то возникновение магнитного порядка в низкотемпературном ромбическом состоянии связано со структурно-индуцированным переходом из парамагнитного гексагонального (типа Ni_2In в ферромагнитное ромбическое (типа $TiNiSi$) состояние $PM(Pnma) \leftrightarrow FM(Pnma)$, Рис.2. Однако из результатов нейтронографических измерений этих германидов следует, что магнитный порядок в ромбическом состоянии для $x \leq 0.11$ соответствует геликоидальной структуре с волновым вектором $k = k_z(x)$ [2] и некоторые модельные результаты могут измениться.

В настоящем сообщении приведены результаты анализа магнитоструктурных переходов при использовании модели типа «смещения» для структурной [3] и модели Гейзенберга для магнитной подсистемы.

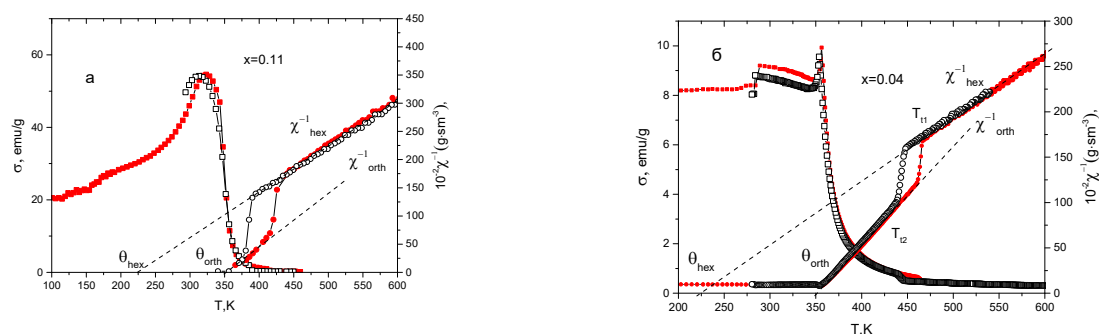


Рис.1. Температурные зависимости намагниченности σ (■, □) и обратной магнитной восприимчивости χ^{-1} (●, ○) в сплавах системы $Mn_{1-x}Cr_xNiGe$ в магнитном поле $H_0 = 8.6 \text{ кЭ}$.

Рассматриваемый подход позволил описать наблюдаемое расщепление $\chi^1(T)$ для случая, когда исходное гексагональное и ромбическое магнитоупорядоченные состояния являются неколлинеарными и предсказать изменение характера магнитных фазовых переходов из парамагнитного в ферромагнитное состояние ($PM-FM$) при наложении магнитного поля или гидростатического давления. Согласно предлагаемой модели парамагнитные структурные переходы $PM(P6_3/mmc) \leftrightarrow PM(Pnma)$, реализуются в результате замораживания коррелированных локальных оптических колебаний ионов Ni или Ge (Рис.2), соответствующих размягчению ($\langle Q_{n\alpha} \rangle \neq 0$)

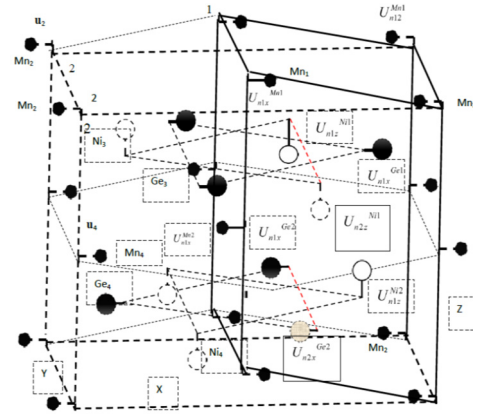


Рис.2. Локальные коррелированные оптические смещения атомов Ni и Ge в гексагональной ячейке MnNiGe.

$U_{n1z}^{Ni1}, (U_{n2z}^{Ni1})$ -смещения Ni1 в 1-й(2-й) ячейках.

α -компонент мягкой локальной моды $Q_{n\alpha}$ (Q_{nz} для Ni) или (Q_{nx} для Ge).

Гамильтониан модели представлен в виде

$$H = H(Q) + H(Q, S) + H(e_1, e_2) \quad (1)$$

$$H(Q) = \frac{1}{2} \sum_n \Omega_0 Q_n^2 + \frac{1}{4} \gamma \sum_n Q_n^4 + \frac{1}{6} \Gamma \sum_n Q_n^6 - \frac{1}{2} \sum_{nn'} v_{nn'} (1 + L_1 e_1 + L_2 e_2) Q_n Q_{n'} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} H_{SQ} = & - \sum_{(nj, n'j')} [J_1 (1 + (\lambda + \lambda_1 e_1 + \lambda_4 Q_n Q_{n'}) Q_n Q_{n'}) \cos \Psi] S_{nj} S_{n'j'} - \\ & - \sum_{(nj, n'j')} [J_2 (1 + (\lambda + \lambda_1 e_1 + \lambda_4 Q_n Q_{n'}) Q_n Q_{n'}) \cos 2\Psi] S_{nj} S_{n'j'} - \\ & - \sum_{(nj, n'j')} [J_{01} (1 + (\lambda + \lambda_1 e_1 + \lambda_4 Q_n Q_{n'}) Q_n Q_{n'})] S_{nj} S_{n'j'} - g\mu_0 H_{0z} S_z \end{aligned} \quad (3)$$

$$H(e_1, e_2) = e_1^2 / 2\kappa + P e_1 - \alpha T e_1 / \kappa + e_2^2 / 2\kappa_e \quad (4)$$

где $Q_n, Q_{n,z} = \frac{1}{a_{0z}} (u_{nz}^{Ni1} - u_{nz}^{Ni2})$; a_{0z} -параметр гексагональной ячейки вдоль оси

z; S_{nj} -оператор спина j -того атома в исходной n -той гексагональной ячейке; U_{nz}^s -оптические смещения s -того атома никеля ($s \in 1, 2$) в ячейке n ; $J_1(J_2)$ -обменные взаимодействия между ближайшими атомами базовых плоскостей перпендикулярных гексагональной оси $h \parallel a_{0z}$, отстоящие на расстояниях $a_{0z}/2(a_{0z})$; J_0 -обменные взаимодействия между ближайшими атомами в базисных плоскостях; $|k_z \pi| = \Psi, \dots$ -угол между спинами атомов ближайших базовых плоскостей; $e_1 = (e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$ и $e_2 = (e_{xx} - e_{yy})/\sqrt{3}$ -объемные и ромбические искажения гексагональной ячейки; $e_{\alpha\alpha}$ -упругие деформации; $g = 2$; μ_0, H_{0z} -магнетон Бора, магнитное поле. Используя приближение

среднего поля для спинового гамильтониана и приближение смещенного гармонического осциллятора для гамильтониана с взаимодействующими мягкими модами термодинамический потенциал магнитоупругой системы, можно представить в виде суммы $\Omega = \Omega(Q_0, \sigma) + \Omega(y) + \Omega(e)$

$$\Omega(Q_0, \sigma) = \frac{N_0}{2} V_0 (Q_0^2 + \sigma) + \frac{N_0}{4} (\gamma Q_0^4 + 6Q_0^2 \sigma + 3\sigma^2) + \frac{N_0}{6} \Gamma (Q_0^6 + 15Q_0^4 \sigma + 45Q_0^2 \sigma^2 + 15\sigma^3) - \frac{1}{2} N_0 Q_0^2 v_0 (1 + L_1 e_1 + L_2 e_2) - T \frac{k_B}{2} N_0 \ln \sigma \quad (5a)$$

$$\Omega(e) = e_1^2 / 2\kappa + P e_1 - \alpha T e_1 / \kappa + e_2^2 / 2\kappa_e \quad (5b)$$

$$\Omega(y) = N s^2 \left[J(k_z) \sin^2(\theta) + J(0) \cos^2(\theta) \right] y^2 - N k_B T \ln Z(X) \quad (5c)$$

$$Z(X) = \left[sh \left(1 + (2s)^{-1} \right) X \right] / sh \left[(2s)^{-1} X \right], \quad (6a)$$

$$X = \left[2s^2 y \left[J(k) \sin^2(\theta) + J(0) \cos^2(\theta) \right] + g \mu_s H_{0z} \cos \theta \right] / k_B T \quad (6b)$$

$$J(k_z) = J_0 + J_1 \cos \psi + J_2 \cos 2\psi, \quad J(0) = J_0 + J_1 + J_2 \quad (6c)$$

$\langle Q_n \rangle = Q_0$ - среднее тепловое значение локальной нормальной координаты мягкой моды Q_n , описывающее замороженное коллективное смещение ионов Ni_1, Ni_2 $\langle U_{nz}^{Ni1,2} \rangle$ в n -той элементарной ячейке при структурном PM переходе $P6_3 / mmc(Q_0 = 0) \leftrightarrow Pnma(Q_0 \neq 0)$; Q_0 - параметр структурного порядка; $\sigma = \langle [Q_n - \langle Q_n \rangle]^2 \rangle$ - дисперсия; $y = \langle S_{nj} \rangle / S$ - параметр магнитного порядка (11b) θ - угол между направлением локальной оси квантования и направлением внешнего поля H_{0z} ; $\alpha, \kappa^{-1}, \kappa_e^{-1}$ - коэффициент объемного температурного расширения и упругие модули; P - внешнее гидростатическое давление; $N(N_0 = N/2)$ - число атомов Mn (число исходных гексагональных элементарных ячеек) в единице объема; θ - угол между направлением локальной оси квантования и направлением внешнего поля H_{0z} ; $\delta = J_1 / 4|J_2| = \cos \psi < 1$; $J_1 > 0, J_2 < 0$. Теоретические зависимости относительной намагниченности $m(T) = y(T) \cos \theta(T)$ и $Q_0(T), \chi^{-1}(T)$ определялись из условий $\partial \Omega / \partial Q_0 = \partial \Omega / \partial \sigma = \partial \Omega / \partial y = \partial \Omega / \partial \theta = 0$ и приведены на Рис.3, Рис.4 для двух значений поля.

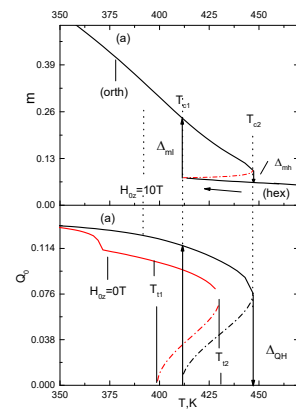
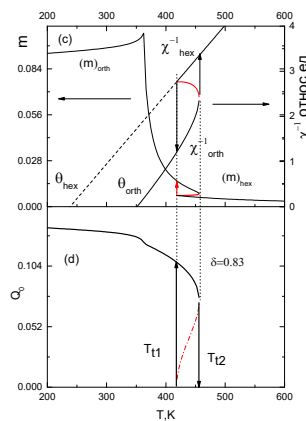
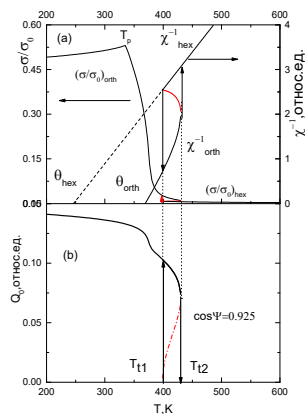


Рис.3. Теоретические зависимости магнитных и структурных характеристик, рассчитанные для скачков намагниченности $\cos\Psi \equiv \delta = 0.93$ (рис.1) и $\delta = 0.04$ (Рис.2).

Рис.4. Возрастание скачков намагниченности Δm в сильном магнитном поле ($\delta = 0.93$)

Выводы:

1. В слабых магнитных полях ($H_0 = 0.86\text{ T}$, Рис.3а-3д) возникновение гелимагнитной структуры реализуется как изоструктурный фазовый переход 2-го рода $PM(orth) \rightarrow SP(orth)$ при сохранении положительных значений парамагнитных температур $\theta(orth)$, $\theta(hex)$. Наведенная намагниченность имеет характерный пик. При $H_0 \rightarrow 0$ T_p совпадает с температурой Нееля (T_N). При охлаждении от $T \gg T_p$ на зависимости $m(T)$ в соответствии с экспериментом (рис. 1, 2) прослеживается аномалия в виде незначительного по величине скачка Δm_l при $T = T_{l1}$. Скачок Δm_l не превышает величины 0.008.

2. В сильных магнитных полях ($H_0 = 10\text{ T}$) гелимагнитное состояние подавляется во всем диапазоне температур вследствие существенного выхода границ лабильности $FM(PM)$ состояний T_{c2} (T_{c1}) в поле за пределы границ лабильности ромбической (гексагональной) фаз без поля- T_{l2} (T_{l1}) (Рис.4). При охлаждении от $T > T_{c2}$ возникновение FM порядка сопровождается существенным скачком намагниченности $\Delta_{ml} \approx 0.2$ и переход $PM(hex) \rightarrow FM(orth)$ можно характеризовать как магнитоструктурный фазовый переход 1-го рода. При нагреве обратный переход $FM(orth) \rightarrow PM(hex)$ близок ко 2-му роду поскольку сопровождается незначительным скачком намагниченности $\Delta_{mh} \ll \Delta_{ml}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания при частичном финансировании РФФИ, грант № 18-07-01320.

- [1] В.И. Вальков, В.И. Каменев, В.И. Митюк и др., ФТТ **59**, 266 (2017)
- [2] A. Szytuła, S. Baran, T. Jaworska-Gołąb et al. Journal of Alloys and Compounds **726**, 978 (2017).
- [3] Б.Блинц, Б.Жекш. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики, Мир, Москва 402, (1982).

Магнитострикционные аномалии редкоземельных фаз Лавеса с морфотропным фазовым переходом

Г.А.Политова^{1,2}, М.А.Ганин¹, А.Б.Михайлова¹, А.В.Филимонов²

¹ Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия
e-mail: gpolitova@gmail.com, ganmax_90@mail.ru, sasham1@mail.ru

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: filimonov@rphf.spbstu.ru

Редкоземельные фазы Лавеса RCO_2 с кубической структурой типа MgCu_2 (C15) известны как высокомагнитострикционные сплавы демонстрирующие большие значения магнитокалорического эффекта в области температуры Кюри. Особая симметрия кубической фазы Лавеса приводит к значительному ромбоэдрическому искажению в направлении (111) в магнитном состоянии. Такое поведение наблюдается в TbCo_2 . Однако метамагнитные переходы в DyCo_2 и GdCo_2 вызывают снижение симметрии кристалла от кубической (парамагнитной) до тетрагональной (ферритмагнитной) структуры. Таким образом, в системе бинарных соединений на основе $(\text{Tb}_x\text{Dy}_{1-x})\text{Co}_2$ при $x \leq 0,2$ искажения являются тетрагональными, а при $x > 0,2$ - ромбоэдрическими [1]. В системе бинарных соединений на основе $(\text{Tb}_x\text{Gd}_{1-x})\text{Co}_2$ при $x \leq 0,9$ искажения являются тетрагональными, а при $x > 0,9$ искажения являются ромбоэдрическими [2]. Также в этих многокомпонентных сплавах наблюдаются морфотропные фазовые переходы, при которых ромбоэдрические искажения меняются на тетрагональные. В данной работе рассмотрены системы многокомпонентных соединений $\text{Tb}_{0.2}\text{Dy}_{0.8-x}\text{Gd}_x\text{Co}_2$ и $\text{Tb}_{0.2}\text{Dy}_{0.8-x}\text{Gd}_x\text{Co}_{1.9}\text{Al}_{0.1}$ ($x = 0-0,5$), в которых наблюдаются подобные переходы [3,4]. Изучена кристаллическая структура сплавов, их магнитные и магнитотепловые свойства, и исследованы магнитострикционные аномалии в области морфотропных фазовых переходов.

На основе высокочистых редкоземельных металлов методом дуговой плавки синтезированы соединения системы $(\text{Tb,Dy,Gd})\text{Co}_2$ и соединения с частичным замещением кобальта на алюминий. Фазовый состав контролировался рентгеновским и металлографическим методами, элементный анализ проводился с помощью сканирующего электронного микроскопа. Проведенная комплексная аттестация показала однородность и однофазность полученных образцов. Определены параметры элементарной ячейки полученных соединений. Измерение намагниченности соединений (изотерм в интервале температур от 90 до 350 К, в магнитном поле до 1.8 Т) методом Белова-Аррота позволили определить температуры магнитных фазовых переходов исследованных соединений. Обнаружено, что все исследованные сплавы в магнитоупорядоченном состоянии с понижением

температуры демонстрируют фазовый переход от ромбоэдрической фазы к тетрагональной.

Магнитокалорический эффект определялся как прямым методом (в магнитном поле до 1.8 Т, так и косвенным методом, с использованием уравнений Максвелла и полученных экспериментальных данных по намагниченности. Тепловое расширение и магнитострикция измерялась тензометрическим методом в интервале температур 80-350 К в магнитных полях до 1.2 Т. Магнитострикция измерялась как вдоль направления приложенного магнитного поля (продольная), так и перпендикулярно ему (поперечная).

Установлено, что при тетрагональных и ромбоэдрических искажениях знаки как продольной, так и поперечной магнитострикций различны. Температурная зависимость продольной и поперечной магнитострикции имеет сложный характер, демонстрируя экстремумы в области фазовых переходов (рис.1).

Выявлена связь между температурным поведением и знаком продольной и поперечной магнитострикции и типом искажения кубической решетки исследуемых фаз Лавеса.

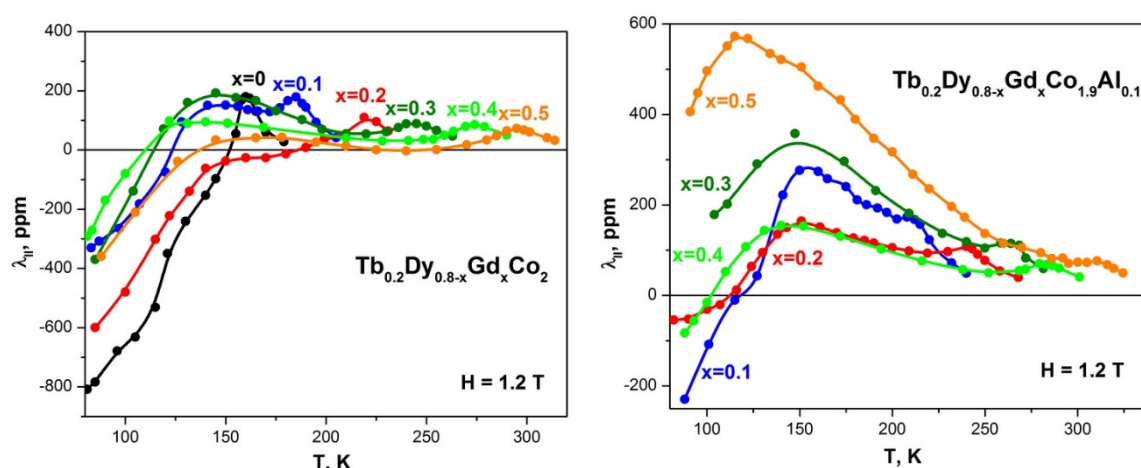


Рис.1. Температурная зависимость продольной магнитострикции соединений систем $Tb_{0.2}Dy_{0.8-x}Gd_xCo_2$ и $Tb_{0.2}Dy_{0.8-x}Gd_xCo_{1.9}Al_{0.1}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-00798-а.

- [1] S. Yang H. Bao, C. Zhou, C Phys. Rev. Lett. 104 197201 (2010).
- [2] C. Zhou, S. Ren, H. Bao, S. Yang, at al., Phys. Rev. B 89 100101(R) (2014).
- [3] G.A. Politova, N.Yu. Pankratov, P.Yu. Vanina, at al., J. Magn. Magn. Mater. 470 50-54 (2019).
- [4] G. Politova, T. Kaminskaya, A. Mikhailova, at al., KEM 806 136-141 (2019)

Магнитотвердые/магнитомягкие гетероструктуры. Исследование методом Монте-Карло.

Т.А.Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: taaev89@mail.ru

Основной характеристикой магнитных материалов является максимальная величина энергетического произведения $(BH)_{max}$. Показатель $(BH)_{max}$ определяется намагниченностью насыщения при достаточной величине коэрцитивной силы и выпуклости петли гистерезиса. Максимум соответствует идеальной прямоугольной петле гистерезиса. В 1991 году был предложен способ для увеличения показателя $(BH)_{max}$ путем создания композитных материалов с чередующимися магнитотвердыми и магнитомягкими слоями [1]. Такие магниты называют обменно-связанными, и они приводят к возникновению ряда необычных явлений, таких как формирование во внешнем магнитном поле одномерной гетерофазной спиновой пружины [2]. На основе двухслойных магнитных гетероструктур теоретически предсказали, что можно достичь гигантского энергетического произведения $(BH)_{max}$ порядка 120 MGOe [3]. Также большие надежды возлагаются на магнитотвердые/магнитомягкие гетероструктуры в свете их практического применения: из-за возможности интегрирования в различные электронные устройства.

Исследование магнитотвердого/магнитомягкого бислоя (Sm-Co)/Fe методами мессбауэровской спектроскопии показало обменно-упругое упорядочение магнитных моментов в плоскости системы [4]. Поэтому для исследования магнитотвердого/магнитомягкого бислоя была использована модель [5-8], обобщающая стандартную XY-модель. Магнитные моменты в данной модели расположены в вершинах простой кубической решетки.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum_i K(S_i^x)^2 - g\mu \sum_i (H_0^x S_i^x + H_0^y S_i^y), \quad (1)$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие каждого магнитного атома с ближайшими соседями внутри слоев с обменами $J = J_{hard}$ и $J = J_{soft}$ в магнитотвердом и магнитомягком слоях соответственно, и межслойное взаимодействие с параметром $J = J_{int}$; вторая сумма учитывает вклад анизотропии в энергию системы, $K = K_{hard}$ и $K = K_{soft}$ – соответственно константы анизотропии магнитотвердого и магнитомягкого слоев; третья сумма – вклад внешнего магнитного поля в энергию системы, $g \approx 2$ – фактор Ланде, μ – магнетон Бора, $H_0^{x,y}$ – проекции внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_0$, $S_i^{x,y}$ – проекции спина $\mathbf{S}_i$, локализованного на узле i , $|\mathbf{S}_i| = 1$.

Расчеты проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [9] для систем с линейными размерами $L_x \times L_y \times L_z$, при температуре T намного ниже T_c для модели магнитного бислоя [5, 6]. Линейные размеры системы принимали различные значения, в зависимости от толщины магнитотвердого и магнитомягкого слоев. В процессе эксперимента совершалось до 5×10^5 МКшагов/спин и проводилось усреднение термодинамических параметров. На систему накладывались периодические граничные условия в двух направлениях (вдоль x - и y -направлений).

Мы исследовали полевые зависимости общей намагниченности M , намагниченностей магнитотвердого и магнитомягкого слоев модели магнитотвердого/магнитомягкого бислоя, а также их продольных и поперечных составляющих. Также мы наблюдали за намагниченностью каждого магнитного монослоя M_j и углами поворота вектора намагниченности монослоя M_j . С помощью этих углов поворота, можно наблюдать детальную картину образования спиновой пружины. Изучили влияние толщины магнитотвердого и магнитомягкого слоев на процессы перемангничивания монослоев для данной модели.

Кроме того, нами было исследовано влияние на процессы перемангничивания значений внутрислойного обменного взаимодействия магнитотвердого J_{hard} , магнитомягкого J_{soft} слоев, межслойного обменного взаимодействия J_{int} , а также констант анизотропии магнитотвердого K_{hard} и магнитомягкого K_{soft} слоев. Впервые получили фазовые диаграммы магнитного бислоя в зависимости от значений обменных параметров. Мы показали, что поведение нашей модели магнитотвердого/магнитомягкого бислоя во внешнем магнитном поле хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями и экспериментальными результатами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00526).

- [1] E.F. Kneller, R. Hawig, IEEE Trans. Magn. **27**, 3588 (1991).
- [2] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **151**, 1084 (2017).
- [3] J. M. D. Coey, R. Skomski, Phys. Scripta. **T49**, 315 (1993).
- [4] V. M. Uzdin, A. Vega, A. Khrenov, et. al., Phys. Rev. B **85**, 024409 (2012).
- [5] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **149**, 1022 (2016).
- [6] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, et. al., Journal of Alloys and Comp. **678**, 167 (2016).
- [7] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **156**, в печати (2019).
- [8] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, Journal of Alloys and Comp. **785**, 1253 (2019).
- [9] N. Metropolis, W. Rosenbluth, N. Rosenbluth, et. al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

Магнитокалорические свойства гидридов интерметаллических соединений редкоземельных металлов и железа $R_2Fe_{14}B$

М.А.Пауков

*Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия,
e-mail: michael.paukov@gmail.com*

Соединения $R_2Fe_{14}B$ привлекают к себе внимание на протяжении последних десятилетий благодаря уникальному сочетанию магнитных характеристик. Тем не менее, магнитокалорические свойства данных соединений в области магнитных фазовых переходов изучались лишь фрагментарно, в то время как свойства гидридов практически не исследовались.

Объектами данного исследования являлись гидриды $Nd_2Fe_{14}BH_x$ ($x = 0; 1; 2.5$) и $Nd_{2-y}Pr_yFe_{14}BH_x$ ($x = 0; 2.5; 4.3; y = 0; 0.5; 1; 1.5, 2$). Все исходные образцы были получены по методу Чохральского, гидрирование проводилось на специальном оборудовании (Карлов Университет, Прага). Исследования магнитокалорического эффекта (МКЭ) проводились в области температуры Кюри и в области спин-переориентационного перехода (СПП) как прямым методом, так и косвенным в магнитных полях до 1.85 Т и 15 Т, соответственно.

Установлено, что наибольшее значение МКЭ наблюдается для исходных соединений $Nd_{2-y}Pr_yFe_{14}B$ в области температуры Кюри. При изменении магнитного поля от 0 до 1.85 Т адиабатическое изменение температуры составляло 1.7-1.8 К. Важно отметить, что данное значение не зависело от сорта редкоземельного иона (Nd или/и Pr). В области температуры СПП (которая меняется в зависимости от y (содержания Pr) от 135 К (для $Nd_2Fe_{14}B$) до 0 (для $Pr_2Fe_{14}B$)) величина эффекта меньше в четыре раза и составляет $\Delta T_{ad} = 0.45$ К при $\mu_0 H = 1.85$ Т.

В гидридах $Nd_2Fe_{14}BH_x$ при введении водорода от 0 до 2.5 ат.Н/ф.у. наблюдается линейное уменьшение величины МКЭ. В гидриде $Nd_2Fe_{14}BH_{2.5}$ $\Delta T_{ad} = 0.33$ К при $\mu_0 H = 1.85$ Т (уменьшение составляет 0.05 К/ат.Н). Другая ситуация наблюдается для Pr – содержащих соединений. Магнитокалорический эффект в области температуры СПП становится близок к 0 как при малых (2.5-2.7 ат.Н/ф.у.), так и при больших (4.3 ат.Н/ф.у.) концентрациях водорода.

В работе получены магнитные фазовые диаграммы для систем $Nd_2Fe_{14}BH_x$ и $Nd_{2-y}Pr_yFe_{14}BH_x$, а также построены зависимости $T_{SRT}(x)$, $\Delta T_{ad}(x)$, $-\Delta S_M(x)$, $-\Delta S_M(T)$, которые могут быть важны при практическом использовании данных материалов.

**Выделение «ориентационного» и «спин-поляронного»
вкладов в колоссальное магнитосопротивление для
 $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$**

Гудин С.А., Солин Н.И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,
г. Екатеринбург, Россия
e-mail: gudin@imp.uran.ru*

Открытие в манганитах колоссального магнитосопротивления эффекта (КМС) стало вызовом для существующей электронной теории вещества. Хотя за последние 20 лет написано несколько тысяч статей посвященных этой проблеме, последовательная микроскопическая теория свойств манганитов так и не создана. Тем не менее было установлено, что возникновение колоссального магнитосопротивления в манганитах связано с образованием неоднородных зарядовых и спиновых состояний.

Наиболее популярная гипотеза, предлагаемая для объяснения КМС, предполагает существование фазового расслоения на низко- и высокорезистивную фазы, размеры которых « r » зависят от магнитного поля H [1-7]. С ростом H низкоомные включения начинают перекрываться, что может привести к сильному уменьшению сопротивления вблизи порога протекания. Этот механизм MR назван «размерным» [8-9] или «спин-поляронным» [10]. Однако при таком фазовом разделении должен существовать дополнительный механизм проводимости, связанный с зависимостью сопротивления между ферромагнитными включениями от угла между направлениями их магнитных моментов. Этот механизм MR в [8-10] назван «ориентационным».

Мы предполагаем, что поляронная проводимость в $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ является основной, сохраняется в низкотемпературном металлоподобном состоянии и определяет эффект КМС. Транспортные свойства «спин-поляронного» или «размерного» механизма проводимости $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ связаны с увеличением размера поляронов при уменьшении температуры и приложении магнитного поля. Основной механизм проводимости – перескоки электронов проводимости с одного ФМ полярона на соседний [2, 6].

Данная работа продолжает магнитные и электрические исследования [11] соединения $\text{La}_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$. В ней представлены результаты расчетов проводимости для области температур от 5 до 90 К в магнитном поле от 0 до 90 кОе. Используя метод разделения вкладов в магнитосопротивление от различных механизмов проводимости [8-11], получено, что для температуры 80 К в малых магнитных полях вклад в магнитосопротивление от «ориентационного» механизма близок к 50%, с увеличением магнитного

поля этот вклад уменьшается, становясь в полях, больших 30 кЭ, малой величиной. Полученные сравнимые по величине вклады в удельную проводимость от «ориентационного» и «спин-поляронного» механизмов однозначно показывают необходимость учета при расчетах магнитосопротивления обоих механизмов проводимости. Вычислено температурное изменение размера полярона (в относительных единицах) в отсутствии магнитного поля и в магнитном поле 90 кЭ.

Авторы благодарят К.И. Кугеля и М.И. Куркина за ценные замечания, сделанные при обсуждении результатов этой работы.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ «Квант» №. АААА-А18-118020190095-4 при частичной поддержке РФФИ (проект № 19-02-01000), УрО РАН (проект № 18-2-2-11).

- [1] Э.Л. Нагаев УФН 166 (8), 833, (1996).
- [2] A.L. Rakhmanov, K.I. Kugel, Ya.M. Blanter, et al., Phys. Rev. B. **63**, 174424 (2001).
- [3] А.О. Сбойчаков, А.Л. Рахманов, К.И. Кугель и др., ЖЭТФ **122**, 869 (2002).
- [4] К.И. Кугель, А.Л. Рахманов, А.О. Сбойчаков и др., ЖЭТФ **125**, 648 (2004).
- [5] E.L. Nagaev Physics Letters A **238**, 299 (1998).
- [6] М.Ю. Каган, К.И. Кугель УФН **171** (6), 577 (2001). М. Yu. Kagan, K.I. Kugel'. Phys.-Usp. **44** (6), 553 (2001).
- [7] А.О. Sboychakov, A.L. Rakhmanov et al., J. Phys.: Condens. Matter. **15**, 1705 (2003).
- [8] С.А. Гудин, М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд и др., ЖЭТФ **148** (5), 1005 (2015). S.A. Gudin, M.I. Kurkin, E.A. Neifel'd, et al., J. Exp.Theor. Phys. **121** (5), 878 (2015).
- [9] М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др., ЖЭТФ **143**, 948 (2013). M.I. Kurkin, E.A. Neifel'd, A.V. Korolev et al., J. Exp.Theor. Phys. **116** (5), 823 (2013).
- [10] С.А. Гудин, Н.Н. Гапонцева, Э.А. Нейфельд и др., Изв. РАН. Сер. Физич. **78** (9), 1142 (2014). S.A. Gudin, N.N. Gapontseva, E.A. Neifel'd et al., Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **78** (9), 900 (2014).
- [11] С.А. Гудин, Н.И. Солин, Н.Н. Гапонцева, ФТТ **60**, 6, 1067 (2018). S. A. Gudin, N. I. Solin, N. N. Gapontseva, Physics of the Solid State **60** (6), 1078 (2018).

Магнитные свойства гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{-H}$ вблизи температуры магнитной компенсации

Н.Ю. Панкратов¹, А.А. Макурenkova¹, А.Ю. Карпенков², М.А. Пауков^{3,4},
И.С. Терешина¹, С.А. Никитин¹

¹ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
e-mail: pankratov@phys.msu.ru

² *Тверской государственный университет, Тверь, Россия*

³ *Карлов Университет, Прага, Чехия*

⁴ *Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия*

Исследования магнитокалорических материалов представляют значительный интерес, который обусловлен широкими возможностями их технического применения в устройствах для магнитного охлаждения [1]. В то же время исследования магнитокалорического эффекта (МКЭ) представляют фундаментальный интерес, поскольку изучение МКЭ позволяет получить важную информацию о магнитной энтропии (S_m), которая сильно изменяется в области магнитных фазовых переходов. Большая часть исследований в этой области посвящена материалам с магнитными фазовыми переходами вблизи комнатной температуры, включая переход из магнитоупорядоченного ферромагнитного состояния в парамагнитное и переходы из антиферромагнитной в ферромагнитную фазу. Однако ферримагнитные материалы с переходным типом магнитной компенсации также представляют интерес для рассмотрения их магнитных и магнитотепловых свойств. Изучение ферримагнитных материалов открывает возможности для поиска новых материалов с заданными свойствами, для использования в магнитных рефрижераторах. Экспериментальное исследование магнитотепловых свойств ферримагнетиков с точкой магнитной компенсации на сегодняшний день немногочисленны.

Магнитную структуру редкоземельных соединений R_2Fe_{17} можно рассматривать в модели двух магнитных подрешеток: ионов редкоземельных элементов (подрешетка R) и ионов 3d-переходных металлов (подрешетка Fe) [2]. Три типа обменных взаимодействий: R-Fe, Fe-Fe и R-R определяют магнитные свойства этих соединений. Большое количество информации об этих взаимодействиях может быть получено путем частичных замещений магнитоактивных ионов редкоземельной или железной подрешеток на немагнитные атомы переходных элементов (например, Ga или Al). В зависимости от типа и концентрации замещающих атомов магнитные свойства легированных соединений претерпевают различные изменения. Известно [3], что внедрение легких элементов (водорода, азота, углерода) в кристаллическую решетку редкоземельных интерметаллидов оказывает влияние, как на кристаллическую структуру,

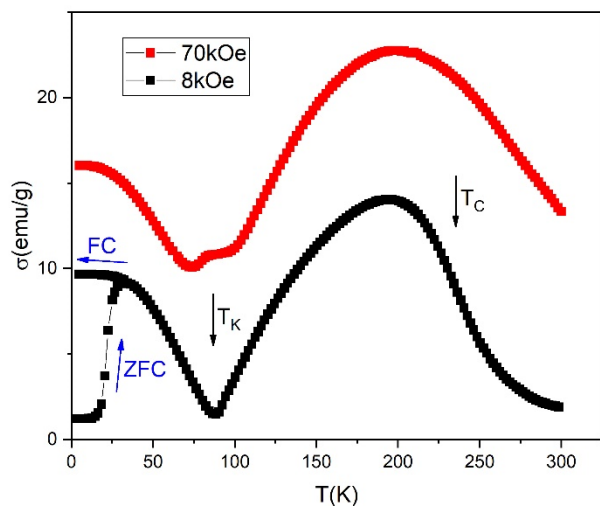


Рис. 1. Температурные зависимость намагниченности гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{-H}$ в полях 8 и 70 кЭ.

наблюдается магнитный переход типа магнитной компенсации при температуре 135 К. Переход из ферромагнитного в парамагнитное состояние наблюдается при температуре Кюри $T_C = 235$ К. Целью нашей работы являлось изучение влияния гидрирования соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ на кристаллическую структуру и магнитные свойства: температуры фазовых переходов, намагниченность, МКЭ в гидриде $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{-H}$.

Исходный интерметаллид $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ был синтезирован методом индукционной плавки с чистотой исходных металлов не менее 99,95%. Гидрид был получен в камере высокого давления при температуре 300 К и давлении водорода 80 Бар. Рентгеноструктурный фазовый анализ показал, что в исходном соединении и его гидриде объем фазы со структурой типа $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ (с пространственной группой $R\bar{3}m$) составляет не менее 97%. Как для гидрида, так и для исходного соединения было обнаружено незначительное количество ($< 3\%$) второй фазы Fe_3Al с кубической структурой (пространственная группа Fmm). Исследования намагниченности гидрида были проведены на SQUID магнитометре в полях до 70 кЭ при температуре от 5 до 300 К.

В нашей работе показано, что тип кристаллической структуры сохраняется при гидрировании соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$.

так и на заполнение электронных оболочек 3d-зоны и зоны проводимости, а также приводит к изменению температуры фазовых переходов, величины магнитного момента, МКЭ и др. Таким образом, наряду с атомами замещения гидрирование редкоземельных интерметаллидов является удобным инструментом для управления их магнитными свойствами.

Ранее [4] было обнаружено, что в ферромагнитном соединении $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$, обладающим ромбоэдрической кристаллической структурой типа $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$,

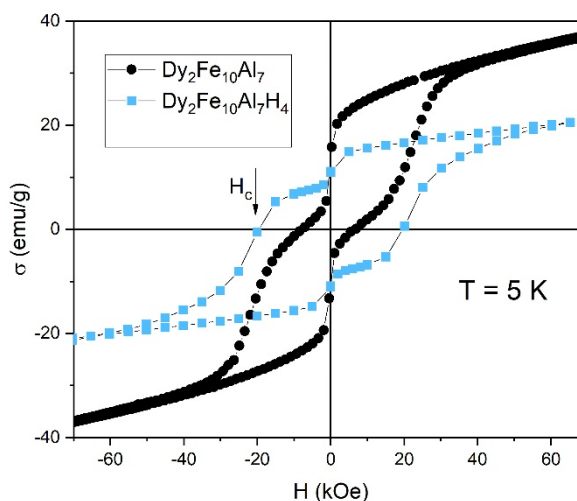


Рис. 2. Петли магнитного гистерезиса для исходного соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ и его гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{-H}$ при температуре 5 К.

Температура Кюри гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{H}_4$ была определена из кривой терромагнитного анализа в магнитном поле 2 кЭ и составляет $T_C = 235$ К, что совпадает с температурой Кюри исходного образца. Температурная зависимость намагниченности в поле 8 кЭ (см. рис. 1) показывает минимум вблизи температуры магнитной компенсации $T_{\text{comp}} = 85$ К, что на 40 К меньше, чем в исходном соединении. В точке магнитной компенсации намагниченности подрешеток Dy и Fe становятся равны друг другу. Соответственно, при $T < T_{\text{comp}}$ намагниченность подрешетки Dy превышает намагниченность подрешетки Fe, а при $T > T_{\text{comp}}$ наоборот [5].

На рис. 2 показаны петли магнитного гистерезиса исходного состава и гидрида при температуре 5 К. Из рисунка видно, что исходное соединение и его гидрид при низких температурах обладает высокой магнитокристаллической анизотропией. Для соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ поле коэрцитивности составляет 7 кЭ, а спонтанная намагниченность 22 ему/г. В результате гидрирования произошло резкое изменение магнитных свойств, а именно поле коэрцитивности возросло до величины 20 кЭ. В тоже время наблюдается уменьшение спонтанной намагниченности до величины 15 ему/г в гидриде $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{H}_4$ при температуре 5 К.

Для детального изучения магнитных и магнитотепловых свойств гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{H}_4$ нами были проведены измерения изотерм намагниченности в магнитных полях до 70 кЭ в интервале температур 60–115 К при последовательном изменении температуры с постоянным шагом 5 К. Полученные изотермы намагниченности (см. рис. 3) не обнаруживают насыщения в магнитных полях до 70 кЭ. В полях выше 20 кЭ наблюдается линейный рост намагниченности при изменении магнитного поля.

В работе получена температурная зависимость изотермического изменения энтропии (ΔS_m) в области перехода. Для ΔS_m при изменении внешнего магнитного поля от 0 до H_0 , с учетом соотношения Максвелла, можно приближенно записать:

$$\Delta S_m = \frac{1}{T_2 - T_1} \left[\int_0^{H_0} M(T_2, H) dH - \int_0^{H_0} M(T_1, H) dH \right].$$

Видно, что изотермическое изменение энтропии при температуре $T = (T_1 + T_2)/2$ определяется площадью между двумя магнитными изотермами, измеренными при температурах T_1 и T_2 , деленной на разность

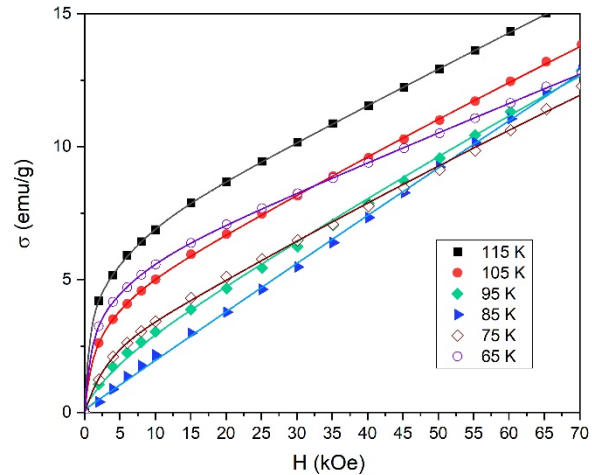


Рис. 3. Кривые намагничивания гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{-H}$ в полях до 70 кЭ вблизи точки магнитной компенсации.

этих температур. На рис. 4 изображены температурные зависимости изменения магнитной части энтропии $\Delta S_m(T)$ в магнитных полях 20 и 50 кЭ. При температуре компенсации (T_{comp}) знак ΔS_m меняется. Изменение знака в точке перехода объясняется следующим. В области $T < T_{\text{comp}}$ магнитный момент подрешетки Dy ориентирован по направлению поля и тогда воздействие поля приводит к уменьшению энтропии. В области температур выше T_{comp} магнитный момент подрешетки Dy ориентирован антипараллельно к направлению внешнего магнитного поля, и воздействие поля приводит к возрастанию магнитной части энтропии S_m .

Таким образом, в нашей работе установлено, что кристаллическая структура и температура Кюри соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ сохраняется при гидрировании. Найдено, что величина коэрцитивной силы возрастает при гидрировании, что позволяет сделать вывод о возрастании магнитокристаллической анизотропии в результате изменения локального окружения иона диспрозия при внедрении атомов водорода в кристаллическую решетку. Уменьшение намагниченности, по-видимому, вызвано уменьшением намагниченности железной подрешетки в результате внедрения атомов водорода в междоузлия. Найдено, что гидрирование соединения $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7$ сильно влияет на температуру перехода типа точка магнитной компенсации.

Исследование выполнено за счет Гранта Российского научного фонда (проект № 18-13-00135).

- [1] J. Lyubina, J. Phys, D: Appl. Phys. **56**, 773 (2017)
- [2] O. Isnard, A. Andreev, O. Heczko, et al. J.Alloys.Comp. **627**, 101 (2015).
- [3] G.Wiesinger, G.Hilscher, Handbook of Magnetic Materials, 17, 293 (2007).
- [4] A.I. Smarzhenskaya, S.A. Nikitin, N.Yu. Pankratov et al. Book of Abstracts of Moscow International Symposium on Magnetism, Moscow, 849–849 (2017).
- [5] К.П. Белов, Эффекты парапроцесса в ферромагнетиках и антиферромагнетиках, Физматлит, Москва (2001).

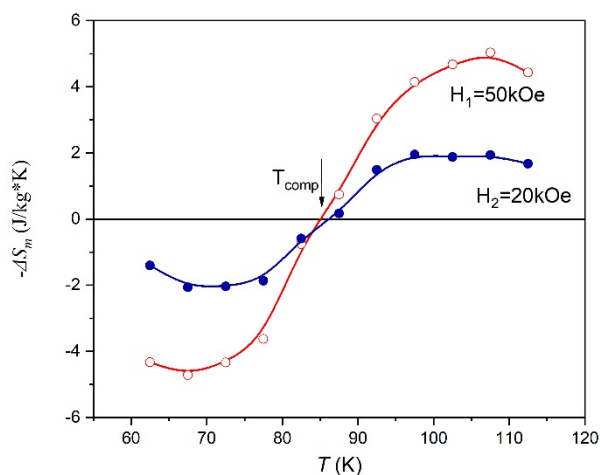


Рис. 4. Температурная зависимость изменения магнитной части энтропии гидрида $\text{Dy}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}_7\text{H}_4$ в полях 20 и 50 кЭ.

Магнитные свойства углеродных композитов, легированных Ni

В.В.Попов, Т.С.Орлова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: 13745pop@mail.ru

Одной из интересных проблем магнитной физики является открытие достаточно сильного пара- и ферромагнетизма в различных модификациях углерода - аморфном углероде, графеновых структурах, фуллеритах, нанотрубках, а также композитах на их основе [1]. Ферромагнетизм наблюдается при высоких температурах (до 800°C), что создает перспективы для его практического применения. Однако существуют трудности в реализации этих идей. Главные из них это недостаточные величины намагниченности насыщения M_s , узкая петля гистерезиса, а также слабая воспроизводимость параметров при одинаковых условиях синтеза. Поскольку считается, что главным фактором, влияющим на магнитные свойства углерода, является наличие дефектов структуры, проводятся эксперименты, позволяющие контролируемо менять их количество и получать информацию о свойствах получаемых таким образом магнитных центров. Так, существенного увеличения максимальных величин M_s удалось достичь для углеродных структур и композитов, получаемых с помощью пиролиза и термообработки различных органических соединений, а также путем синтеза фуллеритов при использовании высоких давлений и температур [2]. Например, одна из максимальных величин $M_s(300K)=0.87 \text{ emu/g}$, была получена в углеродной структуре, полученной при пиролизе циклододекана [3].

В настоящей работе проведено исследование магнитных свойств композитного углеродного материала, и влияния на эти свойства легирования никелем. Композиты были приготовлены прессованием из углеродного березового порошка и природной березовой смолы в весовом соотношении 1:1 без добавления (образец BR), и с добавлением нитрата никеля в количествах ~5 wt.% Ni (BR+5%Ni) и ~8 wt.% Ni (BR+8%Ni). Спрессованные брикеты отжигались в стальном реакторе со скоростью нагрева $2 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$ в атмосфере самогенерирующихся парогазов до достижения 970 °C с последующим охлаждением в течение 2 часов. Согласно рентгеноструктурному анализу, полученные композиты состоят из рентгеноаморфного углерода (образец BR), и из рентгеноаморфного углерода с наночастицами металлического никеля (остальные образцы).

На рис.1 показана зависимость намагниченности от магнитного поля при 300K. Виден типичный гистерезисный вид $M_{FM}(T)$, характерный для ферромагнетиков. При этом, величина намагниченности насыщения достигает величины $M_s = 0.33 \text{ emu/g}$, что близко к значению, полученному

в фуллереновом полимере, синтезированном при давлении $P=6$ GPa и $T=780^\circ\text{C}$ [2]. Величина остаточной намагниченности составляет $M_r=0.032$ emu/g и коэрцитивной силы $H_c=700$ Oe.

На рис. 2 показаны зависимости экспериментальных величин намагниченности $M(H)$ при $T=4\text{K}$. Известно, что в углеродных структурах, как правило, измеряемый магнитный момент M состоит из ряда компонентов: $M=M_D+M_{FM}+M_{PM}$, где M_D – диамагнитная, M_{FM} – ферромагнитная и M_{PM} – парамагнитная составляющие. Как показывает измерение сопротивления, все исследованные составы имеют высокие значения сопротивления, характерные для подобных неупорядоченных систем [4], в результате чего, по-видимому, у нас отсутствует диамагнитная составляющая M_D .

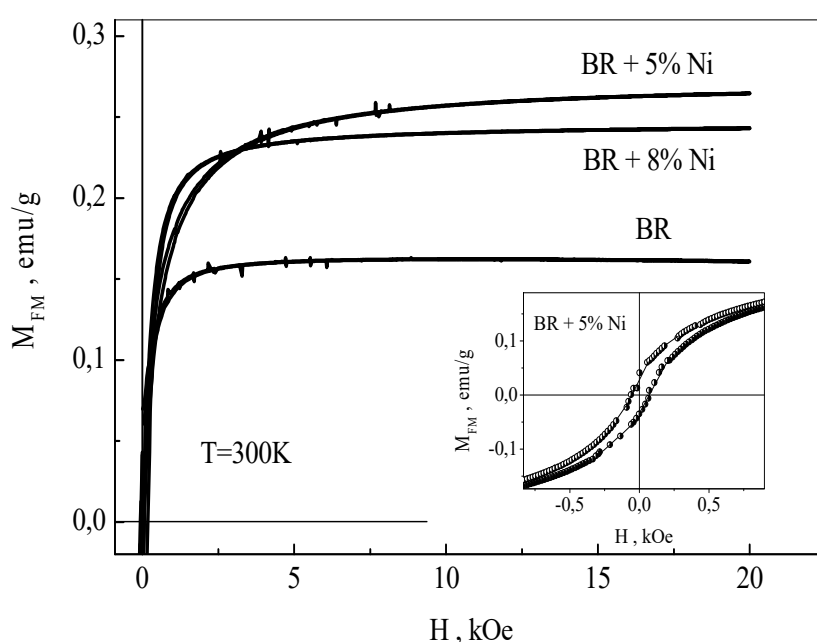


Рис.1. Намагниченность исследованных образцов при $T=300\text{K}$. Вставка - то же, в слабых полях для образца с 5% никеля.

Парамагнитная составляющая начинает играть существенную роль при низких температурах (ниже $T\sim 50-100\text{K}$). Сравнение рисунков 1 и 2 показывает, что добавление Ni, с одной стороны приводит к возрастанию M_{FM} , но с другой стороны понижает величину вклада M_{PM} , которую можно

получить, вычитая из экспериментальной зависимости $M(H)$ ФМ составляющую. Такое поведение является странным, и требует дальнейшего изучения. Анализ выделенной зависимости $M_{PM}(H)$ для нелегированного образца BR показал, что она описывается функцией

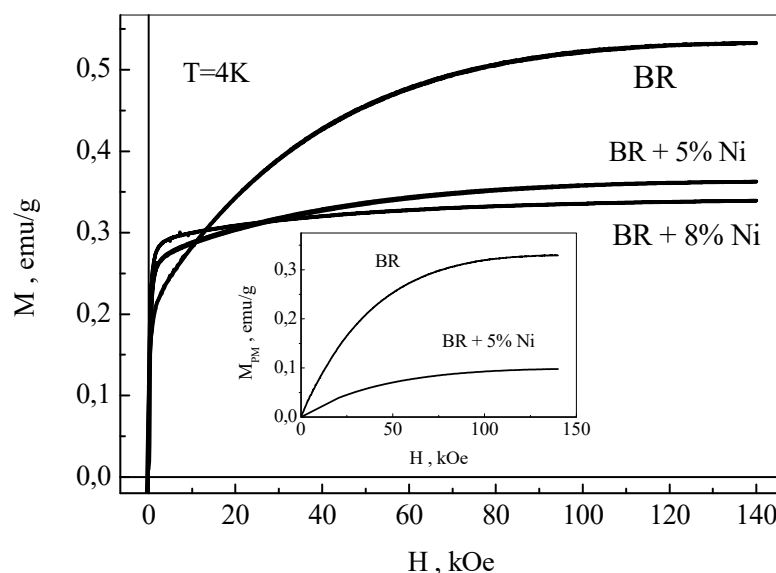


Рис.2. Зависимости экспериментальных величин $M(H)$ при $T=4K$. Вставка: Парамагнитные вклады для двух образцов при $T=4K$.

Бриллюэна, в которой величина полного момента количества движения парамагнитных центров равна $J=1$, а их концентрация N_{PM} составляет $N_{PM}=1,8 \cdot 10^{18} \text{ g}^{-1}$.

Авторы благодарят А.А. Спицына и Д.А. Пономарева (Санкт-Петербургский лесотехнический университет) за предоставление образцов.

- [1] Т.Л.Макарова ФТП **38**, 641 (2004)
- [2] K. Murata, H. Ueda and K. Kawaguchi, Synthetic Metal **44**, 357 (1991)
- [3] V.N.Narozhnyi, K.Muller, D.Eckert, et.al., Physica B **329–333**, 1217 (2003)
- [4] В.В.Попов, Т.С.Орлова, A.Gutierrez-Pardo, J.Ramirez-Rico, ФТТ **57**, 1703 (2015)

Изотермическое выделение тепла под действием сильных магнитных полей в области магнитоструктурного перехода для сплавов Гейслера Ni-Mn-Z (Z = Ga, Sn)

Э.Т. Дильмиева¹, Ю.С. Кошкидько^{1,2}, В.В. Коледов¹, А.П. Каманцев¹,
А.В. Маширов¹, Я. Цвик², В.Г. Шавров¹

¹ *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*
e-mail: dilmieva@cplire.ru

² *Институт низких температур и структурных исследований им. Тшебятовского*
ПАН, Вроцлав, Польша

Особый интерес представляют материалы, которые имеют сильное взаимодействие между кристаллической решеткой и магнитными степенями свободы [1,2], приводящее к термодинамическому фазовому переходу 1-го рода (ФП). Такие ФП под действием внешних параметров (температура, магнитное поле, давление) имеют одновременное изменение магнитных и структурных свойств, и называются магнитоструктурными [1,2]. В магнитоструктурном ФП связь магнитного и структурного переходов, приводит к появлению различных эффектов, таких как гигантское магнитосопротивление [3], магнитокалорический эффект [4,5], магнитострикция [5] и др. Из известных на данный момент сплавы Гейслера и соединения MnAs вызывают большой интерес, т.к. имеют температуры магнитоструктурного ФП вблизи комнатных, что увеличивает прикладное значение, особенно в области магнитного твердотельного охлаждения [6,7].

Магнитоструктурный ФП 1-го рода сопровождается выделением/поглощением тепла Q при воздействии магнитного поля [4]. В рамках МКЭ величина Q – один из важнейших физических параметров, характеризующий максимальное количество тепла, которое может быть передано единицей массы материала от холодного резервуара к горячему в одном термодинамическом цикле [8]. Как правило, Q определяется косвенно, путем расчета на основе уравнения, вытекающего из 2-го начала термодинамики, и соотношения с использованием данных теплоемкости в магнитном поле, что влечет за собой накопление систематических погрешностей [9]. Также к недостаткам косвенного метода определения Q можно отнести то, что применимость термодинамических соотношений для неравновесных процессов вблизи ФП 1-го рода неочевидна. Формулы термодинамики для связи энтропии и потока тепла при необратимых процессах имеют характер неравенств, и смысл равенства приобретают только при обратимых процессах. При таком подходе не учитываются «внутренние» степени свободы. В случае ФП 1-го рода — это границы магнитоструктурных фаз с разной кристаллической структурой и магнитными свойствами в области промежуточного состояния. Отметим, что способы прямого измерения энтропии, в настоящее время неизвестны

[10]. Недавно был предложен метод прямого измерения Q в сильных магнитных полях, позволяющий повысить достоверность измерений [11-14]. Поэтому в данной работе приводится сравнение результатов исследования магнитоиндуцированного выделения/поглощения тепла при магнитоструктурном ФП 1-го рода, определенных косвенным и прямыми методами для сплавов Гейслера семейств Ni-Mn-Z ($Z = \text{Ga, Sn}$).

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект РФФИ №18-08-01434).

- [1] L. H. Lewis, C. H. Marrows, S. Langridge, J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 323002 (2016).
- [2] N.P. Grazhdankina // UFN. **96**, 2 (1968).
- [3] A. P. Ramirez // J. Phys.: Condens. Matter, **9**, 39 (1997).
- [4] V. K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, Phys. Rev. Lett. **78**, 23 (1997).
- [5] R. C. O’Handley, S. J. Murray, M. Marioni, H. Nembach, S. M. Allen, J. Appl. Phys. **87**, 4712 (2000).
- [6] V.V. Khovaylo, K.P. Skokov, Yu.S. Koshkid'ko, V.V. Koledov, V.G. Shavrov, V.D. Buchelnikov, S.V. Taskaev, H. Miki, T. Takagi, A.N.Vasiliev, Phys. Rev. B. **78**, 060403 (2008).
- [7] V.I. Mityuk, N.Yu. Pankratov, G.A. Govor, S.A. Nikitin, A.I. Smarzhevskaya // Phys.Sol.State. **54**, 10 (2012).
- [8] X. Moya, S. KarNarayan and N.D Mathur, Nature Materials. **13**, 439–450 (2014).
- [9] E.T. Dilmieva, A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, V.G. Shavrov, J. Cwik, I.S. Tereshina, Phys.Sol.State. **58**, 81–85 (2016)
- [10] V. Khovaylo, J. Alloys Comp. **577**, S362-S366 (2013).
- [11] E.T. Dilmieva, Yu.S. Koshkid'ko, A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, V.G. Shavrov, V.V. Khovaylo, M.V. Lyange, J. Cwik, L. Gonzalez-Legarreta, H. Blanca Grande, IEEE Trans.Magn. **53**, 11 (2017).
- [12] Yu.S. Koshkid'ko, E.T. Dilmieva, J. Cwik, A.P. Kamantsev, V.V. Khovaylo, V.V. Koledov, V.S. Kraposhin, A.V. Mashirov, V.G. Shavrov, Refrigeration Science and Technology Proceedings, pp. 206-209 (2016).
- [13] A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, E.T.Dilmieva, V.G. Shavrov, J. Cwik, A.S. Los, V.I. Nizhankovskii, K. Rogacki, I.S. Tereshina, Y.S. Koshkid'ko, M.V. Lyange, V.V. Khovaylo, P. Ari-Gur, J.Appl.Phys. **117**, 163903 (2015).
- [14] A.P. Kamantsev, V.V. Koledov, A.V. Mashirov, E.T. Dilmieva, V.G. Shavrov, J. Cwik, I.S. Tereshina. Sol.State Phen. **233-234**, 216-219 (2015).

Магнитная анизотропия в кристаллах марганец-цинковой шпинели, выращенных разными методами

Л.Н.Котов¹, А.П.Петраков¹, П.А.Северин¹, Е.Л.Котова², В.Г.Шавров³

¹ Сиктывкарский государственный университет, Сиктывкар, Россия

e-mail: kotovln@mail.ru

² Санкт–Петербургский горный университет, Санкт–Петербург, Россия

e-mail: satellite24@ya.ru

³ Институт радиотехники и электроники РАН, Москва, Россия

e-mail: shavrov@cplire.ru

В работах [1-3] были опубликованы результаты исследований затухания ультразвуковых волн в кристаллах марганец-цинковой шпинели (МЦШ) состава $Mn_{0,40}Zn_{0,56}Fe_{0,04}^{+2}Fe_2^{+3}O_4$, выращенных методами Вернейля (обозначим их буквой **В**) [1,2] и Бриджмена (обозначим их буквой **Б**) [3]. В кристаллах **В** на частотах 16–40 МГц наблюдался пик гигантского затухания поперечных ультразвуковых волн в интервале температур 220÷290°К [1]. Максимум и пик гигантского затухания был связан со спин-переориентационным фазовым переходом (СПФП). В кристаллах МЦШ, выращенных методом Вернейля, при температурах $T > 285$ К осью легкого намагничивания (ОЛН) является кристаллографическая ось [100], а при понижении температуры до $T < 273$ °К ОЛН совпадает с осью [111] [4]. Такие кристаллы МЦШ могут быть использованы как поглотители ультразвуковых колебаний и волн. В кристаллах, выращенных методом Бриджмена, также было обнаружено большое затухание, но в широком интервале температур, с незначительным максимумом в области температур 220÷290°К [3]. В работе [3] особенности акустических свойств кристаллов МЦШ, выращенных разными методами, объяснялись различными величинами полей анизотропии, и были связаны со степенью разупорядоченности кристаллов и неодинаковым способом упорядочения ионов Fe^{+2} и Fe^{+3} в октаэдрических и тетраэдрических междоузлиях решетки шпинели. Для выяснения значительного отличия температурных зависимостей магнитных и упругих величин для кристаллов МЦШ, выращенных разными методами одного состава, необходимо определить структурные характеристики и расстояния между ближайшими катионами кристаллов при разных температурах: до и в области СПФП.

Определение параметров решетки и координаты электронных облаков катионов монокристаллов МЦШ состава $Mn_{0,40}Zn_{0,56}Fe_{0,04}^{+2}Fe_2^{+3}O_4$, выращенных способами Бриджмена (**Б**) и Вернейля (**В**) было выполнено с помощью монокристалльного четырехкружного рентгеновского дифрактометра Р4 [5] при температурах $T = 295, 273$ К. Источником излучения служила керамическая рентгеновская трубка с молибденовым анодом, разность потенциалов между катодом и анодом 50 кВ, анодный ток 30 мА.

Характеристическое K_{α} -излучение ($\lambda = 0.71 \text{ \AA}$) выделялось из спектра рентгеновской трубки графитовым монохроматором. Интенсивность дифракционного рассеяния регистрировалась сцинтилляционным детектором в экваториальной плоскости (плоскости дифракции). Все системы атомных плоскостей последовательно выводились в вертикальное положение, при котором нормаль к ним, первичный и дифрагированный лучи, находились в одной плоскости.

Исследование структуры начиналось с определения ориентации осей элементарной ячейки по отношению к координатной системе дифрактометра. Производилось это фотометодом, в режиме вращения образца по 8 дифракционным максимумам. Расшифровка и уточнение структуры выполнялось с помощью программы SHELXTL-NT V6.1. Интенсивность дифракционных рефлексов регистрировалась в режиме ω -сканирования. В данном режиме детектор находился в фиксированном положении, а кристалл и, соответственно, узел обратной решетки, пересекающий сферу Эвальда, поворачивался вокруг оси ω . Интервал сканирования составлял 1.5° , с шагом 0.01 .

Структура исследуемой шпинели характерна для соединений типа XY_2O_4 , где X и Y – двух- и трехвалентные катионы, соответственно. Элементарная ячейка шпинели представляет собой куб с удвоенным ребром, содержащим 8 катионов X, 16 катионов Y и 32 аниона O [4]. В исследуемых образцах двухвалентные катионы: Mn^{+2} , Zn^{+2} и Fe^{+2} ; трехвалентные – Fe^{+3} [1]. В таблице 1 приведены параметры кристаллических решеток кристаллов МЦШ, выращенных разными методами при температурах образцов $T = 295 \text{ K}$, 273 K . Параметры кристаллов **Б** не зависят от температуры, значения a и b практически совпадают, а значение c несколько меньше. Исследования при температуре $T = 295 \text{ K}$ кристаллов **В** показали, что их параметры a и b также совпадают, но меньше аналогичных параметров кристаллов, выращенных методом Бриджмена. Значение c значительно меньше, чем a и b . Это отличие параметра c можно оценить степенью гексагональности [3] $a/c \approx 1.01$.

Таблица 1. Параметры элементарных ячеек кристаллов МЦШ

Метод выращивания	Параметры		
	$a, \text{ \AA}$	$b, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$
Бриджмена ($T = 295, 273 \text{ K}$)	8.475 ± 0.002	8.471 ± 0.003	8.458 ± 0.002
Вернейля ($T = 295 \text{ K}$)	8.371 ± 0.009	8.384 ± 0.009	8.292 ± 0.009
Вернейля ($T = 273 \text{ K}$)	8.488 ± 0.001	8.489 ± 0.001	8.488 ± 0.001

Понижение температуры исследования с 295 K до 273 K для кристаллов, выращенных методом Вернейля, приводит к тому, что все три параметра решетки увеличиваются до одинаковой величины, незначительно

превышающей значения a и b кристаллов, выращенных методом Бриджмена.

На рис.1 приведено распределение электронной плотности катионов исследуемых кристаллов вдоль прямой, параллельной оси Z и пересекающей плоскость XY в точке $X_0 = 1/2$, $Y_0 = 1/2$.

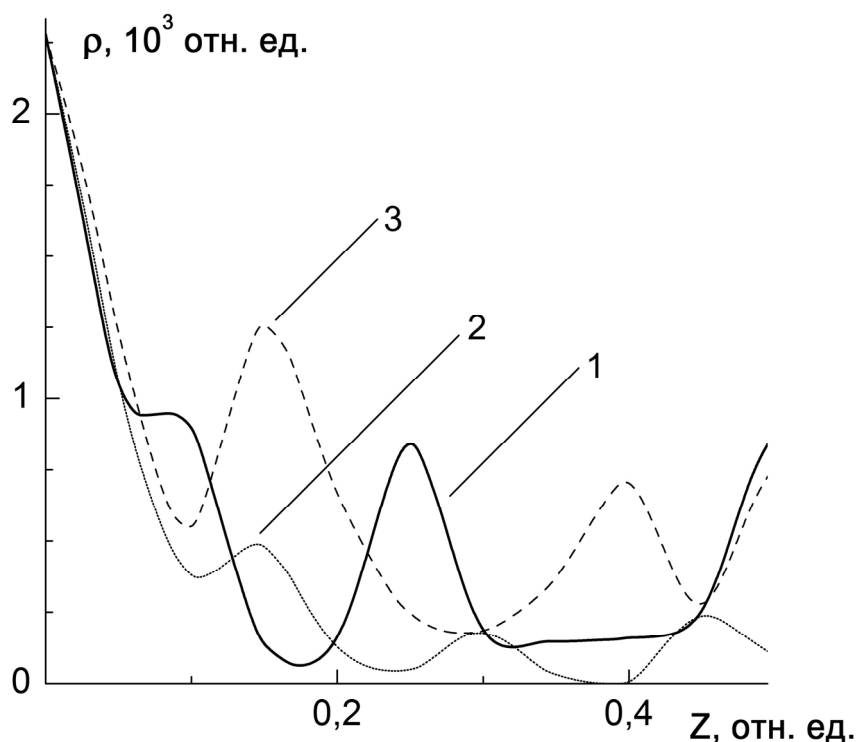


Рис.1 Линейное сечение распределения электронной плотности катионов кристаллов МЦШ: **Б** (кривая 1, $T = 295$, 273 К), **В** (кривые 2 и 3, $T = 295$ и 273 К). Значения координат нормированы на параметр $c = 1$.

Из приведенных данных о параметрах структуры и линейного сечения распределения электронной плотности следует, что у кристаллов, выращенных разными методами, расположение катионов в элементарных ячейках не совпадает даже при одинаковой температуре исследования 295 К. Катион Fe^{+3} у кристаллов **Б** находится в точке $0,1$ (кривая 1). Этот же катион у кристаллов **В** расположен в точке $0,15$ (кривая 2). Один из двухвалентных катионов расположен на кривой 1 в точке $0,25$, а на кривой 2 в точке $0,3$. Другой аналогичный катион смещен в противоположную сторону из точки $0,5$ (кривая 1) в точку $0,45$ (кривая 2). Последний катион находится в точке с координатой меньше, чем $0,5$, с учетом симметрии, этим объясняется меньшее значение параметра c для кристалла **В**, чем для кристалла **Б** (см. Табл.1). С понижением температуры два двухвалентных катиона кристалла **В** смещаются из точек с координатами $0,3$ и $0,45$ (кривая 2) в точки с координатами $0,4$ и $0,5$ (кривая 3), соответственно. Совпадение максимумов в точке $0,5$ на кривых 1 и 3 объясняет близкие значения параметра c при температуре исследования 273 К у кристаллов **В** и **Б** (см.

Табл.1). Это соответствует тому факту, что при 273 К для обоих кристаллов осью легкого намагничивания (ОЛН) является кристаллографическая ось [111]. Неизменность кривых линейного сечения распределения электронной плотности в интервале температур от 273 до 295 К у кристаллов, выращенных методом Бриджмена, означает, что такое изменение температуры не вызывает существенного смещения элементов, образующих кристаллическую решетку. Таким образом, для кристаллов Б ОЛН должна быть кристаллографическая ось [111] в широком интервале температур, поэтому СПФП в кристаллах, выращенных методом Бриджмена, не происходит, и гигантские пики затухания ультразвуковых волн не проявляются при изменении температуры. Полученные данные о расположении катионов решетки кристаллов МЦШ позволяют сделать вывод о том, что магнитный фазовый переход в кристаллах, выращенных методом Вернейля, возникает за счет изменения структуры кристаллов: параметров решетки и распределения электронной плотности катионов внутри ячейки кристалла. На магнитные свойства оказывает наибольшее влияние расположения ионов Fe^{+2} и Fe^{+3} . При $T = 295 \text{ К}$ (до СПФП) положения ионов Fe^{+3} отличаются у кристаллов, выращенных разными методами. При магнитном фазовом переходе у кристаллов, выращенных методом Вернейля, меняются координаты вдоль оси Z проекции двух двухвалентных катионов Mn^{+2} , Zn^{+2} и Fe^{+2} . Изменение структуры решетки, и в том числе положения двухвалентных катионов в сочетании с положением Fe^{+3} при изменении температуры, очевидно, и вызывают магнитный фазовый переход и переориентацию ОЛН в кристаллах МЦШ, выращенных методом Вернейля. Следовательно, используя разные методы выращивания кристаллов одинаковых составов, можно изменять их структурные, магнитные и упругие свойства в широких пределах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты: № 17-02-01138а, №17-57-150001и).

- [1] В.А.Шутилов, Л.Н.Котов, Х. Мирзоахметов, В.М.Сарнацкий, ФТТ **28**, 1783 (1986).
- [2] М.В.Баженов, Л.К.Котов, Акуст. журнал **43**, 744 (1997)
- [3] Л.Н.Котов, С.Н. Карпачев, Письма в ЖТФ **28**, 105 (2002).
- [4] Б.А.Голдин, Л.Н.Котов, Л.К.Зарембо, С.Н.Карпачев. Спин-фононные взаимодействия в кристаллах (ферритах), Наука, Ленинград (1991).
- [5] А.П.Петраков, А.А.Кряжев, ЖТФ **74**, 134 (2004).

Оптические эффекты невязимного поглощения и линейного дихроизма при магнитных фазовых переходах в монокристалле CuV_2O_4

К.Н.Болдырев¹, А.Д.Молчанова¹, М.Н.Попова¹, Р.В.Писарев²

¹ Институт спектроскопии РАН, Москва, Россия

² Физическо-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: kn.boldyrev@gmail.com

Метаборат меди CuV_2O_4 имеет специфическую кристаллическую структуру для безводных боратов (бор скоординирован исключительно тетраэдрически, кислородное окружение меди близко к сверхпроводящим купратам) и обладает тетрагональной нецентросимметричной пространственной группой $I42d$ [1]. Следует отметить, что в этой кристаллической структуре ионы Cu^{2+} расположены в двух неэквивалентных кристаллографических позициях ($4b$ и $8d$) с симметрией S_4 и C_2 [1], что приводит к наличию различных интересных физических свойств.

Магнитная структура метабората меди обладает «сильной» и «слабой» магнитными подсистемами, что связано с двумя неэквивалентными позициями двухвалентной меди. «Сильная» магнитная подсистема представлена ионами Cu^{2+} в позиции $4b$. При $T_N = 21$ К данная подсистема антиферромагнитно упорядочивается в легкоплоскостную структуру (лёгкая плоскость (ab)) [2,3]. «Слабая» же магнитная подсистема представлена ионами Cu^{2+} в позиции $8d$. По результатам нейтронных исследований было показано, что данная структура является квазиодномерной, и не обладает дальним магнитным порядком вплоть до самых низких температур [3,4]. Интересно, что при температуре ниже T_N магнитный момент Cu ($4b$) продолжает расти и при 12 К достигает значения $0,86 \mu\text{B}$ (μB - магнетон Бора). Ионы Cu ($8d$) при тех же параметрах имеют небольшой магнитный момент вдоль оси z , а его значение равняется $0,20 \mu\text{B}$ (он начинает расти ниже фазового перехода при 8 К, где метаборат меди переходит в несоизмеримую геликоидальную фазу).

В работе [5] было выявлено магнитное Давыдовское расщепление экситонов меди, а также был зарегистрирован линейный антиферромагнитный дихроизм (ЛМД) в кристаллически изотропной (ab) плоскости. Было показано, что ЛМД чрезвычайно чувствителен к магнитным структурам в подсистеме $4b$. Изучение температурных зависимостей позволило зафиксировать новые фазовые переходы при температурах 7.9 К и 8.5 К.

Представленная работа содержит результаты исследований спектров пропускания в области первой бесфононной линии CuV_2O_4 . Измерения проводились во внешнем магнитном поле, как в геометрии Фарадея

($\mathbf{B}_{\text{ext}} \parallel \mathbf{k}$), так и в геометрии Фойгта ($\mathbf{B}_{\text{ext}} \perp \mathbf{k}$) в диапазоне 0 – 0.5 Тл. Кроме того, в настоящей работе продолжено исследование магнитных фазовых переходов в CuV_2O_4 методом оптической ЛМД-спектроскопии. При температурах $T < 2$ К (см. рис 1) зарегистрирован каскад магнитных фазовых переходов. Изменения знака сигнала ЛМД при температурах около 2 К, по всей видимости, соответствуют переходам между двумя эллиптическими магнитными структурами, угол между главными осями эллипсов у которых составляет 90° , в то время как при температуре 1.85 К осуществляется переход в простую геликоидальную структуру, которая сохраняется вплоть до самой низкой из исследованных температур ($T = 1.4\text{К}$). Интересно, что в даже очень малом поле (~ 0.05 Тл) низкотемпературные фазовые переходы исчезают, и дихроизм наблюдается вплоть до температуры 1.4 К.

Проведенные измерения свидетельствуют об изменении характера дихроизма при магнитных фазовых переходах (зависимость сигнала линейного антиферромагнитного дихроизма от величины магнитного поля, смена знака дихроизма при различных магнитных фазовых переходах), и показывают чрезвычайную чувствительность ЛМД к магнитным структурам в метаборате меди. Полученные данные позволили предположить тип магнитных структур в каждой части магнитной фазовой диаграммы.

Вторая часть работы посвящена исследованию на предмет асимметрии интенсивности поглощения в зависимости от направления внешнего магнитного поля (т.н. эффект оптической невязимости). Так, при смене знака магнитного поля на противоположный (направление внешнего магнитного поля вдоль кристаллографической оси c), поглощение ряда бесфоновых линий изменяется на гигантскую величину, вплоть до 100% (см. рис.2). Ранее подобный эффект наблюдался в спектрах люминесценции метабората меди. О гигантской (до 70%) асимметрии интенсивности люминесценции между противоположными

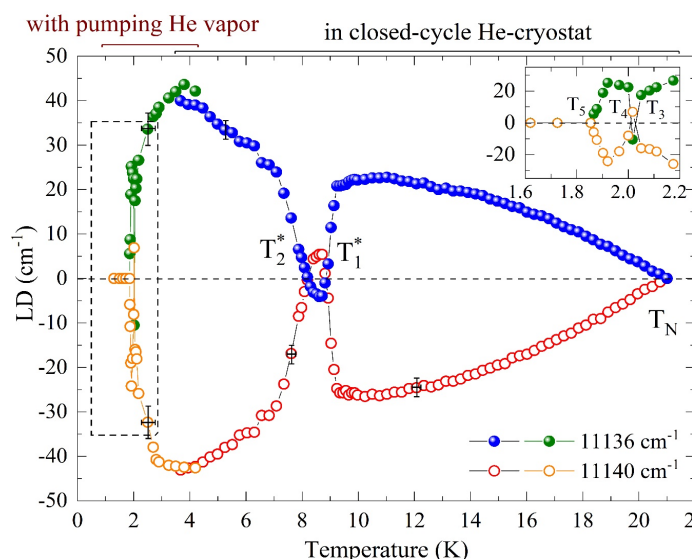


Рис.1 Температурная зависимость сигнала ЛМД CuV_2O_4 в отсутствие внешнего магнитного поля для первой бесфоновой линии 4b (компонент Давыдовского дублета 11136 см^{-1} показан незаполненными кружками, 11140 см^{-1} – заполненными) в области температур 1.4 – 21 К.

направлениями возбуждающего излучения сообщалось в работе [7]. Нами были проведены исследования спектров поглощения как в геометриях Фарадея, так и Фойгта, выявлены особенности при измерениях в поляризованном свете, найдены величины насыщения эффекта при различных температурах. Температурно-магнитно-полевые зависимости показали высокую чувствительность эффекта от магнитных структур и магнитных фазовых переходов. Была предложена модель, описывающая наблюдаемый эффект. Эти исследования позволили нам объяснить новый эффект оптической невзаимности, а также построить уточненную фазовую В-Т диаграмму метабората меди, используя в том числе данные по ЛМД.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-12-00413.

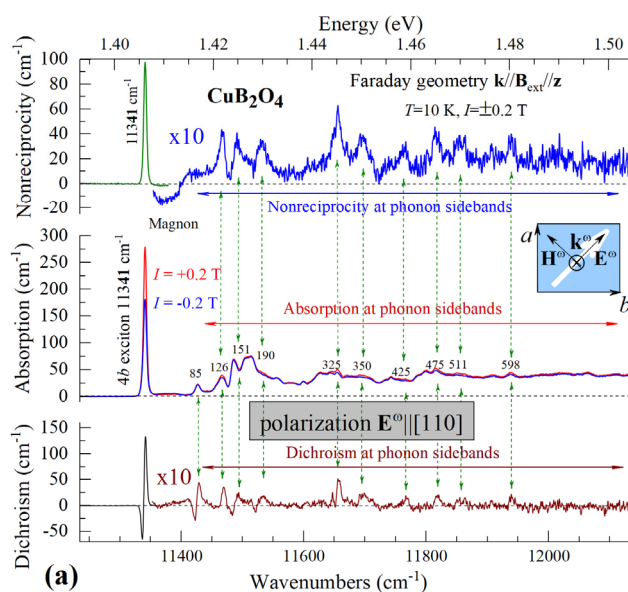


Рис.2 Спектральная область в районе 1ой бесфононной линии Cu^{2+} в позиции 4b и его электронно-колебательных повторений (геометрия Фарадея). Верхняя часть рисунка – оптическая невзаимность при изменении знака внешнего магнитного поля на противоположный; средняя часть рисунка – спектр поглощения при смене знака магнитного поля; Нижняя часть рисунка – сигнал линейного дихроизма при смене направления поляризатора с $[110]$ на $[-110]$.

- [1] M.Martinez-Ripoll, S.Martínez-Carrera, S.García-Blanco, Acta Crystallographica Section B **27**, 677 (1971).
- [2] G.Petrakovskii, D.Velikanov, A.Vorotinov, A.BalaeV, K.Sablina, A.Amato, B.Roessli, J.Schefer, U.Staub, J. Magn. Magn. Mater. **205**, 105 (1999).
- [3] M.Boehm, B.Roessli, J.Schefer, A.Wills, B.Ouladdiaf, E.Lelievre-Berna, U.Staub, G.Petrakovskii, Phys. Rev. B **68**, 024405 (2003).
- [4] S.Martynov, G. Petrakovskii, B.Roessli, J. Magn. Magn. Mater. **269**, 106 (2004).
- [5] K.N.Boldyrev, R.V.Pisarev, L.N.Bezmaternykh, M.N.Popova, Phys. Rev. Lett. **114**, 247210 (2015).
- [6] S.Toyoda, N.Abe, T.Arima, Phys. Rev. B **93**, 201109 (2016).
- [7] A.D.Molchanova, K.N.Boldyrev, Optics and spectroscopy **127**, 33 (2019).

Спектры спиновых волны и измерения намагниченности в монокристалла котоита $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ в сильных магнитных полях

К.Н.Болдырев, А.Д.Молчанова

Институт спектроскопии РАН, Москва, Россия

e-mail: kn.boldyrev@gmail.com

$\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ кристаллизуется в ромбической пространственной группе $Pnnm$ (# 58) со структурой минерала котоита [1]. Ионы никеля Ni^{2+} в элементарной ячейке занимают две неэквивалентные октаэдрические позиции $2a$ и $4f$ (точечные группы симметрии C_{2h} и C_2 , соответственно), формируя две магнитные подсистемы. Обе подсистемы упорядочиваются антиферромагнитно при температуре $T_N = 46$ К [2]. $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ был впервые синтезирован в 60-х годах, тем не менее исследование оптических свойств соединения началось сравнительно недавно. Авторами работы [3] было проведено исследование динамики решётки $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ методами ИК и КРС спектроскопии, дополненное *ab initio* расчётами в рамках метода функционала плотности (DFT). На основании анализа температурных зависимостей частот фононов был сделан вывод о наличии спин-фононного взаимодействия в $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ и о магнитоструктурном характере наблюдаемого в этом соединении фазового перехода.

В продолжение исследования магнитной структуры никелевого ортобората были измерены поляризованные спектры оптического пропускания $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ в терагерцовом диапазоне. На спектрах пропускания были обнаружены две моды 17 и 26 см^{-1} . Диапазон частот и температурная зависимость возбуждений позволили предположить, что они имеют магнитную природу. С целью уточнения природы наблюдаемых особенностей было проведено исследование терагерцовых спектров пропускания никелевого бората в сильных магнитных полях (до 32 Тл). На рисунке 1 приведены частоты магнитных возбуждений, полученных как по низкотемпературным

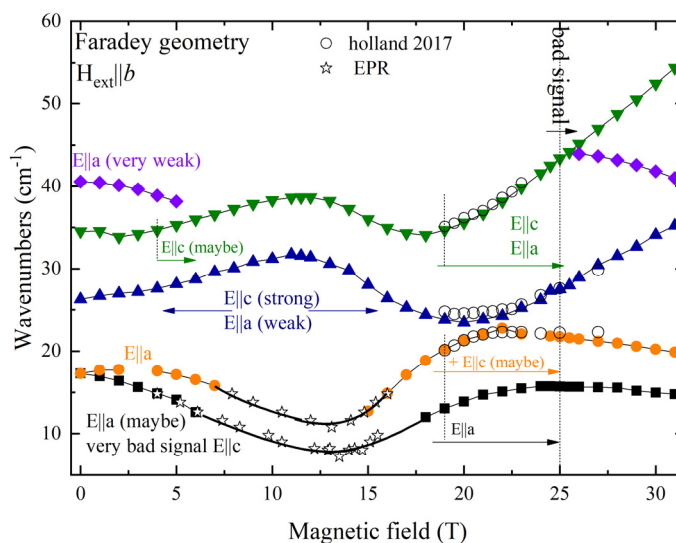


Рис.1 Частоты магнитных возбуждений при температуре 1.5 К, полученные методом высокочастотного ЭПР и по спектрам поглощения терагерцового излучения, в магнитных полях до 32 Тл.

спектрам поглощения в терагерцовом диапазоне ($T = 1.5$ K), так и по высокополевому электронному парамагнитному резонансу (ЭПР). Легко увидеть, что зависимость частот магнитных возбуждений от величины поля имеет ярко выраженный нелинейный характер. Это может указывать на взаимодействие магнитных мод друг с другом (спин-спиновое взаимодействие). Кроме того, в сильных магнитных полях (>10 Тл) наблюдается поведение магнитных мод, указывающее на фазовый переход типа «спин-флоп».

Для выявления характера магнитной динамики, нами было проведено исследование полевой зависимости кривых намагниченности $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ в сильном импульсном магнитном поле ($\mathbf{H}_{\text{ext}}$) до 60 Тл. Измерения проводились для различных направлений $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ вдоль каждой из кристаллографических осей $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$. На кривой, соответствующей направлению магнитного поля вдоль оси c виден спин-переориентационный фазовый переход типа «спин-флоп». Значения полей насыщения (фазовый переход типа «спин-флип») заметно различаются для различных направлений $\mathbf{H}_{\text{ext}}$, что свидетельствует о сильной магнитной анизотропии кристалла.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-32-20142 мол_a_вед.

- [1] W. Götz. *Naturwissenschaften* **50** (17), 567 (1963).
- [2] R.E. Newnham, R.P. Santoro, P.F. Seal, G.R. Stallings. *Phys. Status Solidi B* **16**, K17 (1966).
- [3] R.V. Pisarev, M.A. Prosnikov, V.Yu. Davydov, A.N. Smirnov, E.M. Roginskii, K.N. Boldyrev, A.D. Molchanova, M.N. Popova, M.B. Smirnov, V. Yu. Kazimirov. *Phys. Rev. B*. **93**, 134306 (2016).

ЯМР ^{17}O как метод исследования магнитных фазовых переходов в манганитах

З.Н. Волкова, А.П. Геращенко, С.В. Верховский,
К.Н. Михалев, А.Ю. Гермов
Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: volkovazn@mail.ru

Одной из главных научных проблем физики манганитов является основное состояние электронной системы (однородное/неоднородное), которое устанавливается в результате конкуренции различных типов (ферро- и антиферромагнитного) обменных взаимодействий между спинами локализованных и коллективизированных электронов (дырок) [1-3].

Накопленный за последние годы значительный материал в области исследования этих соединений свидетельствует о необходимости применения локальных экспериментальных методик, таких как ядерный магнитный резонанс. Это позволило бы понять механизм локализации допированных носителей заряда, играющий ключевую роль в формировании фазово-неоднородного состояния. В этой связи большую важность имеют эксперименты по ЯМР на изотопах кислорода ^{17}O , что обусловлено их расположением в кристаллической решетке. В манганитах ядра ^{17}O находятся в первой координационной сфере магнитных ионов Mn. Кроме того, они обладают небольшим квадрупольным моментом и удобны для изучения спиновых корреляций в областях зарядового и спинового упорядочения. Таким образом, ядра ^{17}O могут служить зондами для получения детальной картины распределения локальных магнитных полей, а также зарядовой плотности.

В настоящей работе проведены исследования по ЯМР ^{17}O слабо допированных электронами манганитов с различной степенью допирования и симметрией кристаллической решетки (орторомбической для $\text{CaMnO}_{3-\delta}$, и кубической для $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_{3-\delta}$, $x < 0.02$, $\delta < 0.01$). Проведено сравнение полученных результатов в зависимости от степени электронного допирования и структурных искажений решетки. Показано, что при введении в систему дополнительных электронов формирование ферромагнитной проводящей фазы начинается с зарождения наноразмерных магнитных кластеров (поляронов), которое начинает происходить уже в парамагнитной фазе. Получены оценки времени диффузионных междоузельных перескоков полярона для $\text{CaMnO}_{3-\delta}$ и $\text{SrMnO}_{3-\delta}$. Показано, что в орторомбическом $\text{CaMnO}_{3-\delta}$ структурные искажения приводят к более сильной локализации магнитных поляронов, по сравнению с кубическим $\text{SrMnO}_{3-\delta}$. Экспериментально установлено существование неоднородного магнитного состояния в кубических манганитах с разной степенью и типом допирования $\text{SrMnO}_{3-\delta}$ и Sr_{1-}

$x\text{La}_x\text{MnO}_3$. Скошенная магнитная структура в $\text{SrMnO}_{3-\delta}$ формируется только во внешнем магнитное поле. При малом допировании лантаном в соединениях $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ симметрия зарядового окружения центрального иона (Sr^{2+} , La^{3+}) близка к кубической, что свидетельствует об отсутствии локальных Ян-Теллеровских искажений вблизи лантана.

Таким образом, было показано, что метод ЯМР ^{17}O эффективен для исследования микроскопии формирования неоднородного магнитного состояния в электронно-допированных манганитах.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-32-00030, в рамках государственного задания по теме «Функция» № АААА-А19-119012990095-0.

[1] C. Zener, Phys. Rev. **81**, 440 (1951).

[2] P. Andersen and H. Hasegawa, Phys. Rev. **100**, 675 (1955).

[3] P.-G. de Gennes, Phys. Rev. **118**, 141 (1960).

Сверхпроводимость допированных кобальтом соединений BaFe_2As_2 в области антиферромагнитного перехода

А.Е.Каракозов¹, М.В.Магницкая¹, Л.С.Кадыров², Б.П.Горшунов²

¹ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия

e-mail: karakozov@mtu-net.ru

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

e-mail: bpgorshunov@gmail.com

Квазидвумерные железосодержащие сверхпроводники (FeSCs) с сильно анизотропной поверхностью Ферми (ПФ) и низкой плотностью носителей в дырочных (с центром в точке Г) и электронных (с центрами в точках $X = (\pi, 0)$ и $Y = (0, \pi)$) зонах потенциально относятся к системам с коррелированными электронами. Электрон-электронные корреляции в FeSCs по сравнению с ВТСП-купратами относительно невелики. Исходные железосодержащие соединения, в отличие ВТСП-купратов, являются антиферромагнитными (АФМ) металлами, имеющими на поверхности Ферми не связанные с магнетизмом электронные состояния, доступные для сверхпроводящего (СП) спаривания. При увеличении допирования подавление антиферромагнетизма приводит к появлению сверхпроводимости. В этом режиме на ПФ сосуществуют АФМ и СП щели.

Экспериментально в различных FeSCs наблюдаются параметры порядка как с s, так и с d (с узлами на некоторых участках ПФ) симметрией. Сильную анизотропию параметра порядка обычно связывают с нефононным (электрон-электронным) механизмом сверхпроводимости. Косвенно на нефононную природу сверхпроводимости FeSCs могут указывать экспериментально наблюдаемые в FeSCs на больших (порядка АФМ векторов $\mathbf{Q} = (\pi, 0), (0, \pi)$) волновых векторах $\mathbf{q}$ (межзонные) изотропные спиновые и на малых $\mathbf{q}$ (внутризонные) квадрупольные $d_{x^2-y^2}$ зарядовые (орбитальные) электронные флуктуации. Неофононная (с отталкивающим межэлектронным взаимодействием) СП в таких системах возможна только при доминировании межзонного взаимодействия, которое всегда увеличивает СП щели и T_c . Согласно спин-флуктуационной (СФ) теории, в FeSCs с дырочным (h) и электронным (e) карманами всегда существует канал нефононной сверхпроводимости, так как в этих сверхпроводниках межзонное взаимодействие $V_{eh}(\mathbf{Q})$ из-за усиления спиновыми флуктуациями с тем же волновым вектором $\mathbf{Q}$ превышает внутризонное кулоновское отталкивание U_c при малых q . В зависимости от знака V_{eh} в системе формируется либо щель с противоположными знаками на e и h карманах ПФ (так называемое $s_{\pm}$ -спаривание: $V_{eh} > 0$, рис. 1) либо традиционное s_{++} -спаривание ($V_{eh} < 0$). Интенсивность спиновых флуктуаций определяется близостью к АФМ переходу и сильно зависит от допинга. На рисунке 1 показаны доминирующие механизмы нефононной

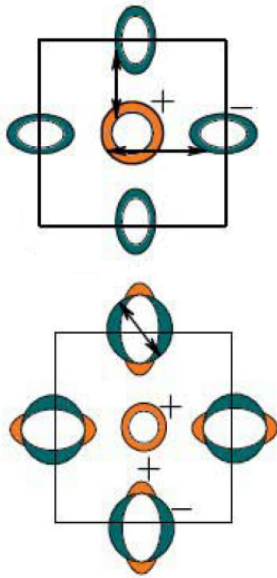


Рис.1 Доминирующие нефононные взаимодействия вблизи (верх) и вдали (низ) от АФМ перехода.

сверхпроводимости вблизи и вдали от АФМ перехода. Электрон-фононное притяжение U_{EP} уменьшает электрон-электронное отталкивание во всех нефононных каналах и может преобразовать знакопеременную щель с узлами в знакопостоянную щель с минимумами. С учетом электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) влияние СФ механизма на сверхпроводимость в e и h зонах становится неодинаковым из-за различной плотности состояний γ_n (и ЭФВ) и доминирующие механизмы СП в e и h зонах могут различаться, а также изменяться при изменении допинга x в зависимости от величины $\gamma_n(x)$ и $V_{eh}(x)$ в зонах.

Прямое сравнение СФ теории с экспериментом осложняется тем, что в наиболее полно изученных оптимально допированных FeSCs из-за сильного V_{eh} взаимодействия ($V_{eh} > U_{EP}$) доминирующие h и e щели сближаются и в пределах экспериментальной погрешности совпадают (объединяются в кластер).

В этой области $V_{eh} \geq U_{EP}$ двухзонные уравнения сверхпроводимости линейно зависимы и допускают неоднозначную интерпретацию механизма сверхпроводимости. В частности, в пределах экспериментальной погрешности свойства FeSCs с близкими h и e щелями всегда могут быть объяснены сильным межзонным e - h взаимодействием (СФ теорией), что, однако не является убедительным доказательством. Более надежно оценить межзонное e - h взаимодействие удастся в перепопированных FeSCs вдали от АФМ перехода относительно слабым V_{eh} и существенно различающимися e и h щелями — «трехщелевых» FeSCs (рис. 2).

Последующее исследование допинговой эволюции трехщелевого состояния при уменьшении допинга в сравнении с результатами СФ теории позволяет выяснить роль нефононных механизмов в FeSCs.

На рис. 3 показаны примеры эволюции электронной теплоемкости передопированных «трехщелевых» FeSCs в область АФМ перехода и оптимальных (с максимальной T_c) концентраций допинга. Уменьшение $c_s(x, t)$ при промежуточных температурах и соответствующее сохранению энтропии $\int_0^1 c_s(x, t) dt = 1$ увеличение $c_s(x, t)$ вблизи T_c указывает на сближение электронной Δ_e и максимальной дырочной Δ_{2h} щелей по мере приближения к АФМ переходу и увеличении $V_{eh}(x)$, как и предполагается СФ теорией. Однако плотность состояний $\gamma_n(x)$ (и ЭФВ) согласно [1–3] также увеличивается при уменьшении допинга, достигая

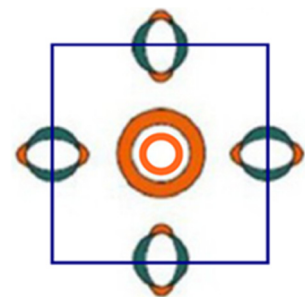


Рис.2 Схематическая структура трехщелевых сверхпроводников.

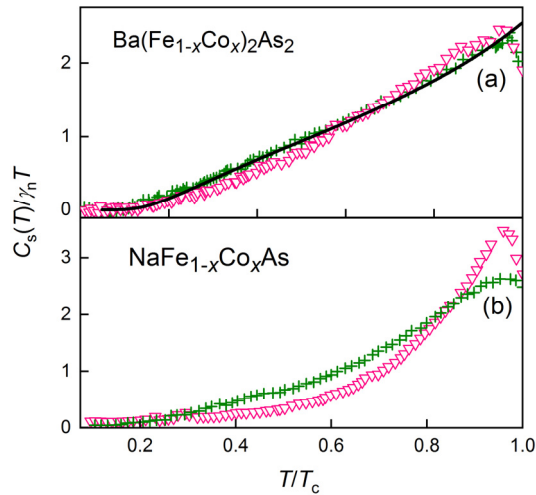


Рис.3 Электронная теплоемкость для $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ [1] и $NaFe_{0.95}Co_{0.05}As$ [2]; линия – 3-зонная аппроксимация.

исследовать $c_s(x, t)$ удастся только для наиболее подробно изученного семейства $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ с привлечением имеющихся результатов исследования терагерцовых и ИК оптических спектров, коэффициента отражения и фотоэмиссионных спектров.

Примеры трехзонной аппроксимации электронной теплоемкости $c_s(x, t)$ в $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ для некоторых концентраций допинга показаны на рис. 4. Допинговая зависимость СП щелей $\Delta_j(x)$ и $T_c(x)$ связана с изменением констант внутризонного спаривания $\lambda_{II}^0 \approx U(q \rightarrow 0)\gamma_{ni}(x)$ и межзонного взаимодействия $\lambda_{I \neq J}^0 \approx V(\mathbf{Q}, x)\gamma_{nj}(x)$. Определяемое допинговой зависимостью интенсивности спиновых флуктуаций $V(\mathbf{Q}, x)$ при уменьшении электронного допирования увеличивается, достигая максимума вблизи АФМ перехода. Анализ зависимости $c_s(x, t)$ $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ показывает, что в передопированном режиме вдали от АФМ перехода межзонное СФ взаимодействие $V_{eh}(x)$ мало по сравнению с внутризонным. СП состояние имеет *трехщелевую* структуру, в которой анизотропная (без узлов) s+d электронная (e) щель занимает промежуточное положение между доминирующей внутренней (2h) и внешней (1h) изотропными дырочными щелями.

Сверхпроводимость передопированных соединений $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ с доминирующим внутризонным спариванием и слабым СФ 2h-e взаимодействием не может быть объяснена только СФ теорией с отталкивающим при малых q кулоновским внутризонным взаимодействием U_C без учета сильного ЭФВ. Корреляционные эффекты в передопированных соединениях проявляются только в e-зоне с малой плотностью состояний $\gamma_e(x)$, в которой внутризонное ЭФВ усиливается взаимодействием с $d_{x^2-y^2}$ зарядовыми флуктуациями с малыми волновыми векторами. Допинговая зависимость критической температуры передопи-

максимума при оптимальных концентрациях и роль фононного и нефононного механизмов в увеличении T_c остается неясной.

БКШ-подобный анализ [3] экспериментальных данных FeSCs позволяет определять величину и симметрию СП щелей, а также эффективные константы межзонного взаимодействия и исследовать вклад электрон-электронных корреляций в сверхпроводимость FeSCs. Из-за большого числа подгоночных параметров в трехзонных БКШ-подобных уравнениях достоверно

рованных $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ может быть объяснена увеличением внутризонного ЭФВ спаривания в $2h$ зоне вследствие увеличения плотности состояний при уменьшении допинга.

Вблизи АФМ перехода электронная e -щель резко возрастает, сближаясь с доминирующей $2h$ щелью. Анализ показывает, что увеличение e -щели связано с допинговым увеличением межзонного e - $2h$ взаимодействия и может быть объяснено наблюдаемой в $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ сильной допинговой зависимостью интенсивности спиновых флуктуаций в области АФМ перехода. Такое же (двухщелевое) состояние с близкими электронными и внутренними дырочными щелями сохраняется и в фазе сосуществования АФМ и СП. В этой фазе дырочные щели и связанная сильным СФ взаимодействием с $2h$ зоной e -щель уменьшаются при уменьшении допирования, как и плотность доступных для СП спаривания состояний из-за конкуренции с открывающейся АФМ щелью. Анализ показывает, что плотность состояний $\gamma_e(x)$ (и внутризонное ЭФВ) в e -зоне существенно меньше чем в h -зонах. Поэтому корреляционные эффекты проявляются в e -зоне наиболее сильно, и допинговая зависимость e -щели определяется главным образом сильной допинговой зависимостью интенсивности спиновых флуктуаций в области АФМ перехода. В отличие от коррелированной e -зоны, в h -зонах с существенно большей плотностью состояний и ЭФВ межзонное h - e СФ взаимодействие мало по сравнению с ЭФВ. Допинговая зависимость $1,2h$ -щелей и температуры $2\Delta_{1h}(x)/T_c(x) = 2$; $2\Delta_{2h}(x)/T_c(x) = 5$ как до, так и после АФМ перехода связана с изменением плотности состояний в h -зонах и объясняется допинговой зависимостью ЭФВ. Таким образом, $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ являются традиционным сверхпроводником, но с анизотропным параметром порядка. Нефононный механизм является причиной наблюдаемой экспериментально анизотропии параметра порядка, но в $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ не является доминирующим.

Работа поддержана РФФИ (гранты 18-02-01075 и 19-02-00509).

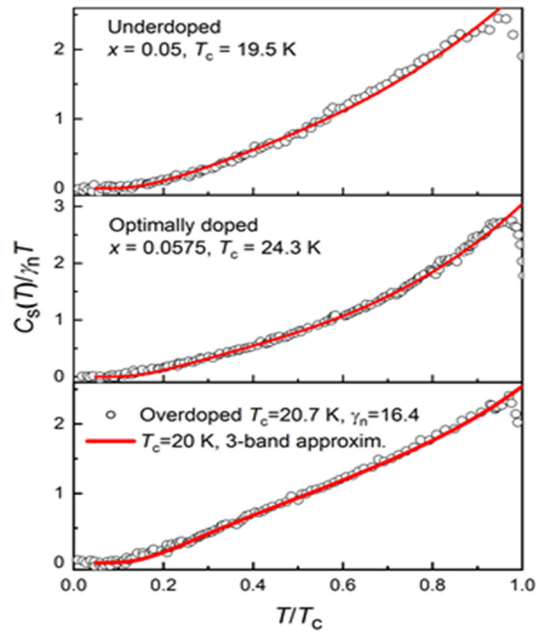


Рис.4 Электронная теплоемкость $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ при различном допировании [3]; сплошная линия – наша трехзонная аппроксимация.

- [1] F.Hardy et al., EPL **91**, 47008 (2010).
- [2] G.T.Tan et al., Phys. Rev. B **87**, 144512 (2013).
- [3] A.E.Karakozov et al., Phys. Rev. B **90**, 014506 (2014).

Влияние парциального давления кислорода на температуру магнитного фазового перехода в CaFe_2O_4

Ю. В. Князев¹, О. А. Баюков¹, А. Г. Аншиц², Н. Н. Шишкина²,
Е. В. Рабчевский², Н. П. Кирик²

¹ Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН,
660036 Красноярск, Россия

² Институт химии и химической технологии, ФИЦ КНЦ СО РАН,
660036 Красноярск, Россия
e-mail: yuvknyazev@mail.ru

Многие материалы со структурой шпинели под влиянием гидростатического давления приобретают кристаллическую структуру CaFe_2O_4 -типа [1,2]. При этом происходит изменение электронных свойств вещества. Например, LiMn_2O_4 был деформирован в кристаллическую структуру CaFe_2O_4 -типа, что позволило уменьшить энергию активации до 0.27 эВ с 0.40 эВ для структуры шпинели [1], то есть при переходе к структурному типу CaFe_2O_4 с орторомбической структурой возможно увеличение прыжковой подвижности материалов со структурой шпинелей, что может качественно сказаться на их применении. Другим способом формирования материалов структурного типа CaFe_2O_4 является использование катионов щелочноземельных металлов с ионным радиусом $> 1.0 \text{ \AA}$ (например, Ca, Ba, Sr) в качестве катионов замещения в ферритах, структура которых в результате химического давления катионов переформируются в структуру ромбической сингонии (пространственная группа $R\bar{3}m$) [3-5]. В таких ферритах железо занимает только октаэдрические позиции, а катионы щелочноземельных металлов находятся

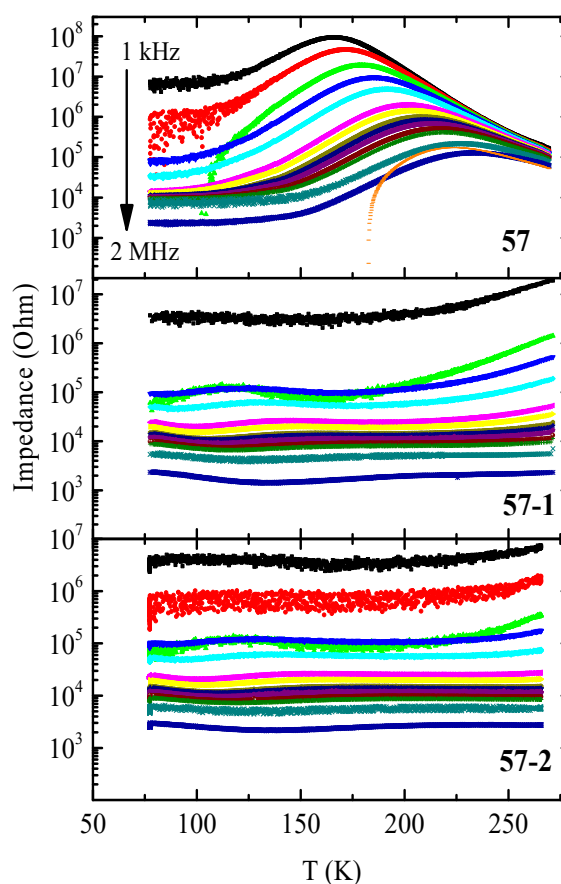


Рис. 1 Температурная зависимость импеданса образцов при различных частотах переменного тока.

в додекаэдрическом окружении кислорода с координационным числом 8. Большое внимание в настоящее время уделяется изучению электронных и магнитных свойств Са-феррита [6-9].

В данной работе методом твёрдофазного синтеза мы получили образцы CaFe_2O_4 без примесей посторонних фаз, которые были подвержены обработке в инертной атмосфере (образцы 57-1, 57-2) для изучения влияния электронных свойств с помощью измерений методами мёссбауэровской в температурном интервале 4-300 К, EXAFS-, XANES-спектроскопии, а также dc-, ac- электрической проводимости.

В результате было показано, что обработка в инертной атмосфере приводит к изменению зонной структуры образца (рис. 1). Мёссбауэровская спектроскопия продемонстрировала корреляцию между содержанием кислорода в атмосфере и температуры магнитного фазового перехода, которая для необработанного образца составляет по нашим данным около 155 К. Изменение температуры магнитного упорядочения выполнено по температурной зависимости сверхтонкого поля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: №18-42-243011 «Исследование влияния состава и особенностей дефектной структуры композиционных материалов «ядро-оболочка» на основе CaFe_2O_4 на их электронные и каталитические свойства» и программы УМНИК.

- [1] K Yamaura, Q Huang, L Zhang, K Takada, J. AM. CHEM. SOC., **128**, 9448-9456 (2006).
- [2] A. M. Arévalo-López, A. J. Dos santos-García, E. Castillo-Martínez, A. Duran, M. Á. Alario-Franco, Inorganic chemistry **49**, 2827-2833 (2010).
- [3] F. P. Glasser and L. D. Glasser. J. Am. Ceram. Soc., **46**, 377 (1963).
- [4] B. F. Decker and J. S. Kasper. Acta Crystallogr., 1957, 332 (1957).
- [5] C. Do-Dinh, E. F. Bertaut, and J. Chappert. J. Phys. (Paris), **30**, 566 (1969).
- [6] K. Obata, Y. Obukuro, S. Matsushima et al. J. Ceram. Soc. Jpn, **121**, 766 (2013).
- [7] E. V. Tsipis, Y. V. Pivak, J. C. Waerenborgh et al. Solid State Ionics, **178**, 1428 (2007).
- [8] V. V. Kharton, E. V. Tsipis, V. A. Kolotygin et al. J. Electrochem. Soc., **155**, 13 (2008).
- [9] A. Samariya, S. N. Dolia, A. S. Prasad, P. K. Sharma, S. P. Pareek, M. S. Dhawan, S. Kumar, Current Applied Physics **13**, 830e835 (2013).

Исследование процессов перемагничивания модели магнитотвердого/магнитомягкого бислоя

М.М.Исаева, Т.А.Тааев

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: madina.isaeva.92@mail.ru

Качество постоянных магнитов характеризуется максимальным энергетическим произведением $(BH)_{max}$. Показатель $(BH)_{max}$ определяется намагниченностью насыщения при достаточной величине коэрцитивной силы и выпуклости петли гистерезиса. Максимум соответствует идеальной прямоугольной петле гистерезиса. Для увеличения показателя $(BH)_{max}$ исследователи предложили создавать композитные материалы, с чередующимися магнитотвердыми и магнитомягкими слоями [1]. Такие магниты называют обменно-связанными. Магнитомягкий слой характеризуется высоким значением намагниченности насыщения, а магнитотвердый – высокой анизотропией и придает обменно-связанную устойчивость магнитомягкому слою от размагничивания.

Для исследования магнитотвердого/магнитомягкого бислоя мы используем стандартную ХУ-модель [2-4]. Магнитные моменты в данной модели расположены в вершинах простой кубической решетки.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum_i K (S_i^x)^2 - g\mu \sum_i (H_0^x S_i^x + H_0^y S_i^y), \quad (1)$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие каждого магнитного атома с ближайшими соседями внутри слоев; вторая сумма учитывает вклад анизотропии в энергию системы; третья сумма – вклад внешнего магнитного поля, $g \approx 2$ – фактор Ланде, μ – магнетон Бора, $H_0^{x,y}$ – проекции вектора внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_0$, $S_i^{x,y}$ – проекции спина $\mathbf{S}_i$, локализованного на узле i , $|\mathbf{S}_i| = 1$.

В ходе численного эксперимента нами были использованы следующие значения параметров: $J_s = 2.8 \times 10^{-6}$ Эрг/см, $J_h = 1.2 \times 10^{-6}$ Эрг/см, $J_i = 1.8 \times 10^{-6}$ Эрг/см, $K_h \times d^2 / J_s = 7.14 \times 10^{-3}$, $K_s = 0$, $d = 2$ Å – расстояние между атомными слоями, $|\mathbf{S}_i| = 1$ [2]. В гамильтониане (1) значения обменных констант и констант анизотропии были нормированы к J_s . Угол между вектором внешнего магнитного поля и осью анизотропии магнитотвердого слоя равен 177° .

Расчеты проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [5] для систем с линейными размерами $L_x \times L_y \times L_z$, при температуре T намного ниже T_c для модели магнитного бислоя [2, 4]. Линейные размеры системы принимали различные значения, в зависимости

как от толщины магнитотвердого и магнитомягкого слоев, так и от размеров вдоль осей x и y .

Нами были исследованы следующие системы:

- 1) $S1$ – одинаковые толщины магнитотвердого и магнитомягкого слоев (от 10 до 50 атомных слоев).
- 2) $S2$ – постоянная толщина магнитотвердого слоя ($t_h = 50$), варьирование толщины магнитомягкого слоя от 10 до 50 атомных слоев.
- 3) $S3$ – постоянная толщина магнитомягкого слоя ($t_s = 50$), варьирование толщины магнитотвердого слоя от 5 до 50 атомных слоев.

Для систем $S1$ - $S3$ линейные размеры по осям x и y были фиксированы ($Lx = Ly = 50$).

- 4) $S4$ – постоянная толщина магнитного бислоя вдоль оси z ($Lz = 100$), варьирование поперечных размеров модели вдоль осей x и y от 50 до 100, т.е. $Lx = Ly = 50 \div 100$.

В рамках данной модели были получены полевые зависимости общей намагниченности, поперечной и продольной составляющих общей намагниченности как для систем в целом, так и для магнитотвердого и магнитомягкого слоев по отдельности. Также мы наблюдали за намагниченностью каждого магнитного монослоя M_j и углами поворота вектора намагниченности монослоя M_j . С помощью этих углов поворота, можно наблюдать детальную картину образования спиновой пружины.

Исследование влияния толщины магнитотвердого слоя на процессы перемагничивания при фиксированной толщине магнитомягкого слоя показало, что критическое значение H_{irr} не меняется вплоть до 20 атомных слоев магнитотвердого слоя. Магнитные бислои *25hard/50soft* и *50hard/50soft* обладают схожими магнитоупругими свойствами. Увеличение магнитомягкого слоя при фиксированной толщине магнитотвердого слоя уменьшаются характеристические значения внешнего магнитного поля H_{ex} и H_{irr} . При уменьшении размеров модели вдоль осей x и y характеристическое значение H_{ex} увеличивается. Петля становится более выпуклой. Это свидетельствует об улучшении магнитоупругих свойств системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00526).

- [1] E.F. Kneller, R. Hawig, IEEE Trans. Magn. **27**, 3588 (1991).
- [2] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **151**, 1084 (2017).
- [3] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **149**, 1022 (2016).
- [4] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, et. al., Journal of Alloys and Comp. **678**, 167 (2016).
- [5] N. Metropolis, W. Rosenbluth, N. Rosenbluth, et. al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

Влияние обменных параметров и констант анизотропии на поведение модели магнитотвердого/магнитомягкого бислоя во внешнем магнитном поле

Ш.К. Хизриев, Т.А. Тааев

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: shakhban1994@gmail.com

Основная идея и большая привлекательность магнитотвердых/магнитомягких гетероструктур заключается в том, что они открывают возможность для увеличения максимального энергетического произведения $(BH)_{max}$ [1, 2]. Также в них возникает ряд необычных явлений, таких как формирование во внешнем магнитном поле одномерной гетерофазной спиновой пружины (обменно-связанное поведение). В связи с чем, возлагаются большие надежды на магнитотвердые/магнитомягкие гетероструктуры в свете их практического применения: изготовление постоянных магнитов, создание быстродействующих аттенюаторов, совершенных микро – и наноустройств для хранения, передачи и обработки информации и др.

Для исследования магнитотвердого/магнитомягкого бислоя мы используем стандартную XY-модель [3-6]. Магнитные моменты в данной модели расположены в вершинах простой кубической решетки.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - \sum_i K (S_i^x)^2 - g\mu \sum_i (H_0^x S_i^x + H_0^y S_i^y), \quad (1)$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие каждого магнитного атома с ближайшими соседями внутри слоев; вторая сумма учитывает вклад анизотропии в энергию системы; третья сумма – вклад внешнего магнитного поля, $g \approx 2$ – фактор Ланде, μ – магнетон Бора, $H_0^{x,y}$ – проекции вектора внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_0$, $S_i^{x,y}$ – проекции спина $\mathbf{S}_i$, локализованного на узле i , $|\mathbf{S}_i| = 1$.

Расчеты проводились для модели магнитного бислоя (1) стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [7] для систем с линейными размерами $Lx \times Ly \times Lz$, при температуре T намного ниже T_c . Вдоль x - и y -направлений линейные размеры системы были равны $Lx=Ly=50$, а вдоль z -оси – $Lz=100$, то есть рассматривалась модель при толщине магнитотвердого и магнитомягкого слоев по 50 атомных слоев, соответственно. В процессе эксперимента совершалось до 5×10^5 МКшагов/спин и проводилось усреднение термодинамических параметров. На систему накладывались периодические граничные условия в двух направлениях (вдоль x - и y -направлений) [3-5].

В рамках данной модели были получены полевые зависимости общей намагниченности M , поперечной M_{tran} и продольной M_{long} составляющих общей намагниченности в зависимости от значений констант обменного взаимодействия магнитотвердого J_{hard} , магнитомягкого J_{soft} слоев и межслойного обменного взаимодействия J_{int} . Также мы наблюдали за намагниченностью каждого магнитного монослоя M_j и углами поворота вектора намагниченности монослоя M_j . И, в свою очередь, было исследовано влияние значений констант анизотропии магнитотвердого K_{hard} и магнитомягкого слоев K_{soft} на поведение модели магнитного бислоя во внешнем магнитном поле.

На рис. 1 приведена фазовая диаграмма «spring – non-spring» модели магнитотвердого/магнитомягкого бислоя. Диаграмма представляет собой зависимости характеристических значений магнитных полей H_{irr} и H_{ex} от величины констант обменного взаимодействия магнитомягкого слоя J_{soft} . Значения обменных констант магнитотвердого слоя и межслойного взаимодействия были фиксированы.

«Spring» – область, соответствующая значениям внешнего магнитного поля и обменных параметров, при которых в магнитном бислое образуется спиновая пружина во внешнем магнитном поле. Точки на фазовых кривых – это характеристические значения магнитных полей H_{irr} и H_{ex} . H_0 – внешнее магнитное поле.

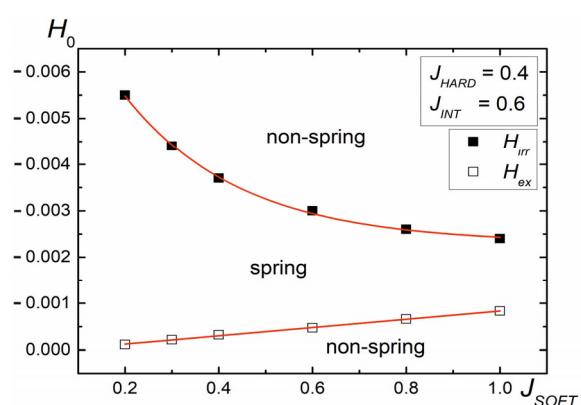


Рис.1. Фазовая диаграмма зависимости характеристических значений магнитных полей H_{irr} и H_{ex} от константы обменного взаимодействия магнитомягкого слоя J_{soft} .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-32-00526).

- [1] E.F. Kneller, R. Hawig, IEEE Trans. Magn. **27**, 3588 (1991).
- [2] J. M. D. Coey, R. Skomski, Phys. Scripta. **T49**, 315 (1993)
- [3] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **149**, 1022 (2016).
- [4] Т.А. Тааев, К.Ш. Khizriev, A.K. Murtazaev, et. al., Journal of Alloys and Comp. **678**, 167 (2016).
- [5] Т.А. Тааев, К.Ш. Хизриев, А.К. Муртазаев, ЖЭТФ **156**, в печати (2019).
- [6] Т.А. Тааев, К.Ш. Khizriev, A.K. Murtazaev, Journal of Alloys and Comp. **785**, 1253 (2019).
- [7] N. Metropolis, W. Rosenbluth, N. Rosenbluth, et. al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

Исследование структуры и магнитных свойств сплавов Fe-Pd-Rh первопринципными методами

О.О.Павлухина, В.Д.Бучельников, В.В.Соколовский, М.А.Загребин

Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия

e-mail: pavluhinaoo@mail.ru

В последние годы сплавы на основе Fe-Rh и Fe-Pd являются предметом многих теоретических и экспериментальных исследований. Сплавы на основе Fe-Rh могут использоваться в устройствах магнитного охлаждения, магнитной записи и спинтроники. Ферромагнитные сплавы с эффектом памяти формы на основе Fe-Pd представляют большой интерес в связи с возможностью их применения в качестве функционального материала в миниатюрных системах [1, 2]. Сплав $\text{Fe}_{0.5}\text{Pd}_{0.5}$ имеет структуру типа CuAu, в работе [3] были исследованы свойства таких сплавов. Сплав $\text{Fe}_{0.5}\text{Rh}_{0.5}$ имеет кристаллическую структуру, типа CsCl. В таких сплавах наблюдается метамагнитный фазовый переход при температурах близких к комнатным. Метамагнитный фазовый переход в Fe-Rh также приводит к большим изменениям намагниченности, что обуславливает гигантский магнитокалорический эффект при изменении магнитного поля. Значение магнитокалорического эффекта в таких сплавах достигает рекордных значений на сегодняшний день [4].

Далее рассмотрим сплавы Fe-Rh-Pd. В работе [5] магнитокалорические свойства сплавов $\text{Fe}_{49}(\text{Rh}_{1-x}\text{Pd}_x)_{51}$ ($x = 0-0.09$) были измерены прямым методом. Адиабатические изменения температуры $\text{Fe}_{49}(\text{Rh}_{1-x}\text{Pd}_x)_{51}$ были проведены прямыми методами. В работе сказано, что замена Pd на Rh (менее 8%) позволила получить более широкий диапазон для наблюдения магнитокалорического эффекта. В работе [6] были экспериментально исследованы магнитные свойства сплавов $\text{FeRh}_{1-x}\text{Pd}_x$. Добавление Pt в сплав Fe-Rh стабилизирует упорядоченную структуру bct, где соотношение c/a изменяется от 1.18 до 1.36. Теоретические исследования помогают описать и понять явления, происходящие в материале. Поэтому в нашей предыдущей работе сплавы Fe-Rh-(Z) были исследованы с использованием первопринципных методов [7, 8]. Концентрация третьего элемента составляла 0, 0.125, 0.25 и 0.375. В работе [9] полные энергии для сплавов FeRh, FePd, MnRh и MnPd рассчитаны для структур типа CsCl и CuAu. Показано, что сплав FePd является ферромагнитным.

В данной работе исследованы структура и магнитные свойства сплавов Fe-Pd, легированных Rh, с использованием пакета Vienna *Ab initio* Simulation (VASP). Вычисления выполнены на суперячейке, содержащей 16 атомов с различными начальными конфигурациями спинов (NM, FM и AFM). Для структуры типа CuAu были исследованы NM, FM и три антиферромагнитных (AFM-I, AFM-II и AFM-III) состояния (рис. 1).

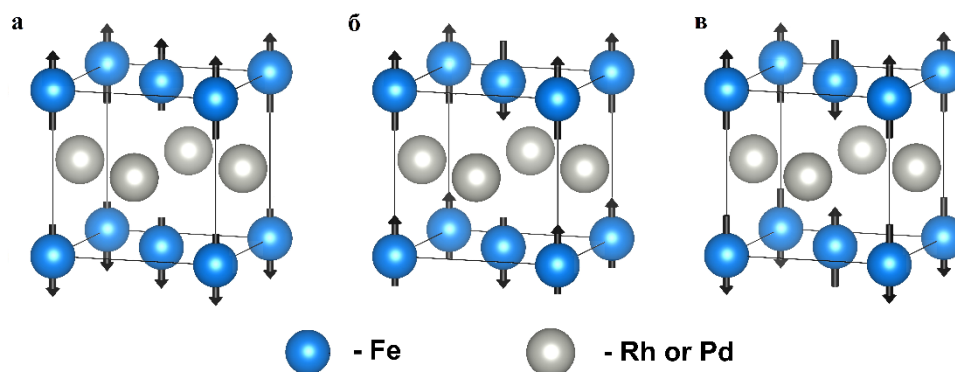


Рис.1 Магнитные спиновые конфигурации (структура типа CuAu) (а) AFM-I, (б) AFM-II, (в) AFM-III.

В наших расчетах в рассматриваемой ячейке (в случае FM-упорядочения) атомы родия и палладия обладали небольшим магнитным моментом (менее 1 μ_B). Для структуры типа CsCl были исследованы NM, FM и AFM состояния (рис. 2).

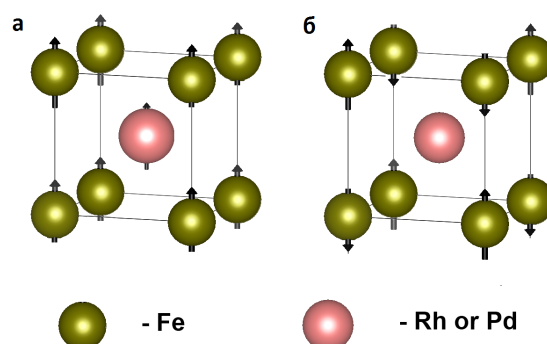


Рис.2 Магнитные спиновые конфигурации (структура типа CsCl) (а) FM, (б) AFM.

На первом этапе были рассчитаны параметры решетки, энергии, магнитные моменты, энергии формирования $\text{FeRh}_{1-x}\text{Pd}_x$ ($x=0.75, 0.875, 1$) с различными типами магнитного упорядочения (Таб. 1-3). Рассчитанный параметр решетки для сплава FePd хорошо согласуется с экспериментальными и теоретическими значениями [6, 9]. Из полученных в работе данных можно сделать вывод, что полная энергия в ферромагнитном состоянии со структурой типа CuAu минимальна для FePd, $\text{FeRh}_{0.125}\text{Pd}_{0.875}$, $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$.

Из полученных данных найдено, что параметры решетки c для энергетически выгодной конфигурации ($c = 3.706, 3.736, 3.771$ для $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$, $\text{FeRh}_{0.125}\text{Pd}_{0.875}$, FePd соответственно) увеличиваются с увеличением содержания палладия, а параметры решетки a ($a = 3.844, 3.835, 3.825$ для $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$, $\text{FeRh}_{0.125}\text{Pd}_{0.875}$, FePd, соответственно) уменьшаются с увеличением содержания палладия. Так же установлено, что с увеличением содержания палладия общий магнитный момент уменьшается ($M_{\text{tot}} = 3.344, 3.306, 3.264$ для $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$, $\text{FeRh}_{0.125}\text{Pd}_{0.875}$, FePd

соответственно). В случае антиферромагнитного упорядочения атомов в рассматриваемой ячейке магнитный момент атомов палладия и родия был равен нулю.

Таблица 1. Параметры решетки, энергии, магнитные моменты, энергии формирования FePd с различными типами магнитного упорядочения.

		a, Å	c, Å	M_{tot} , (μ_B /f.u.)	M_{Fe} , ($\mathcal{M}_B$)	M_{Pd} , ($\mathcal{M}_B$)	E (eV)	E_{form} (eV/f.u)
CsCl- ТИП.	FM	3.047	3.047	3.345	3.090	0.255	-106.69	0.1229
	AFM	3.043	3.043	0	± 3.075	0	-106.63	0.1303
	NM	2.965	2.965	-	-	-	-99.18	1.0625
CuAu- ТИП.	FM	3.825	3.771	3.264	2.957	0.307	-108.62	-0.1178
	AFM-I	3.873	3.686	0	± 3.004	0	-108.04	-0.0458
	AFM-II	3.963	3.534	0	± 2.866	0	-106.28	0.1748
	AFM-III	3.866	3.688	0	± 3.001	0	-107.52	0.0202
	NM	3.733	3.679	-	-	-	-101.72	0.7449

Таблица 2. Параметры решетки, энергии, магнитные моменты, энергии формирования FeRh_{0.125}Pd_{0.875} с различными типами магнитного упорядочения.

		a, Å	c, Å	M_{tot} , (μ_B /f.u.)	M_{Fe} , ($\mathcal{M}_B$)	M_{Rh} , ($\mathcal{M}_B$)	M_{Pd} , ($\mathcal{M}_B$)	E (eV)	E_{form} (eV/f.u)
CsCl- type struct.	FM	3.042	3.042	3.440	3.104	0.850	0.263	-108.93	0.1013
	AFM	3.034	3.034	0	± 3.068	0	0	-108.95	0.0983
	NM	2.963	2.963	-	-	-	-	-101.43	1.0384
CuAu- type struct.	FM	3.835	3.736	3.306	2.957	0.688	0.301	-110.56	-0.1025
	AFM-I	3.869	3.675	0	± 2.981	0	0	-110.10	-0.0458
	AFM-II	3.960	3.523	0	± 2.890	0	0	-108.66	0.1344
	AFM-III	3.888	3.637	0	± 3.021	0	0	-109.81	-0.0093
	NM	3.721	3.678	-	-	-	-	-104.21	0.6904

Таблица 3. Параметры решетки, энергии, магнитные моменты, энергии формирования $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$ с различными типами магнитного упорядочения.

		a, Å	c, Å	M_{tot} , (μ_B /f.u.)	M_{Fe} , ($\mathcal{M}_B$)	M_{Rh} , ($\mathcal{M}_B$)	M_{Pd} , ($\mathcal{M}_B$)	E (eV)	E_{form} (eV/f.u)
CsCl-type struct.	FM	3.031	2.778	3.508	3.079	0.812	0.3017	-111.27	0.0655
	AFM	3.092	2.895	0	± 3.064	0	0	-111.29	0.0626
	NM	3.114	2.669	-	-	-	-	-104.15	0.9557
CuAu-type struct.	FM	3.844	3.706	3.344	2.960	0.663	0.291	-112.48	-0.0853
	AFM-I	3.859	3.665	0	± 2.954	0	0	-112.15	-0.0449
	AFM-II	3.953	3.509	0	± 2.916	0	0	-110.99	0.2119
	AFM-III	3.893	3.605	0	± 3.014	0	0	-112.09	-0.0369
	NM	3.710	3.675	-	-	-	-	-106.65	0.6432

В данной работе исследованы плотности электронных состояний для сплавов Fe-Rh-Pd. Спиновая поляризация для сплавов FePd, $\text{FeRh}_{0.125}\text{Pd}_{0.875}$, $\text{FeRh}_{0.25}\text{Pd}_{0.75}$ составила 65%, 57%, 57% соответственно.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда номер 17-72-20022

- [1] V. Recarte, C. Gomez-Polo, V. Sanchez-Alarcos, J.I. Perez-Landazabal, J. Magn. Magn. Mater. **316**, e614 (2007)
- [2] R. Oshima, M. Sugiyama, J. de Phys **42**, C4-383 (1982)
- [3] T. Mehaddene, E. Kentzinger, B. Hennion, K. Tanaka, H. Numakura, A. Marty, V. Parasote, M. C. Cadeville, M. Zemirli, V. Pierron-Bohnes, Phys. Rev. B. **69**, 024304 (2004)
- [4] K. Chirkova, P. Skokov, L. Schultz et al. Acta Mater. **106**, 15 (2016)
- [5] K. Nishimura, Y. Nakazawa, L. Li, K. Mori, Materials Transactions. **49**, 1753 (2008)
- [6] S. Yuasa, H. Miyajima, Y. Otani, A. Sakuma, J. of the Phys. Society of Japan. **64**, 4906 (1995)
- [7] O. Pavlukhina, V. Buchelnikov, V. Sokolovskiy, M. Zagrebin, J. Magn. Magn. Mater. **476**, 325 (2019)
- [8] O. Pavlukhina, V. Sokolovskiy, M. Zagrebin, V. Buchelnikov, J. Magn. Magn. Mater. **470**, 68 (2019)
- [9] H. Yamada, H. Shimizu, K. Yamamoto, K. Uebayashi, J. Alloys Comp. **415**, 31 (2006)

Магнитный фазовый переход в монокристалле LuCo_3 , индуцированный сильным магнитным полем

Д.С.Незнахин¹, А.В.Андреев², Д.И.Горбунов^{2,3}, Д.И.Радзивончик⁴,
М.И.Барташевич¹

¹ Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
e-mail: d.s.neznakhin@urfu.ru

² Institute of Physics, Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

³ Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD-EMFL), Helmholtz-Zentrum, Dresden, Germany

⁴ Институт физики металлов им. М.Н.Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Интерметаллиды RCO_3 (R – редкоземельный металл) образуют соединения имеющие ферро- и ферримангнитные типы упорядочения [1]. Магнитное состояние в этих соединениях определяется обменными взаимодействиями между электронами d и f подуровней. Особое место занимает соединение YCo_3 , поскольку в нем магнитный момент несут только ионы Co. Используя его, можно определять магнитный вклад редкоземельной подсистемы в соединениях RCO_3 с редкоземельными элементами. В соединении YCo_3 существует переход кобальта из низкоспинового состояния в высокоспиновое при увеличении магнитного поля. Причем данный переход происходит в 2 этапа при индукции магнитного поля 60 Т и 82 Т [2]. Другим соединением в семействе RCO_3 , имеющим магнитный момент только на ионах кобальта, является соединение LuCo_3 . В настоящей работе проведены измерения кривых намагничивания монокристалла LuCo_3 в сильных магнитных полях.

Монокристалл LuCo_3 синтезирован методом Чохральского из химических элементов чистотой не хуже 99,98%. Проведена аттестация монокристалла с использованием рентгеноструктурного анализа и метода Лауэ. Измерения проводились в магнитных полях с индукцией до 58 Т вдоль различных кристаллографических направлений. На кривых намагничивания, измеренных вдоль осей c и a, монокристалла LuCo_3 обнаружено резкое изменение намагниченности. Данный фазовый переход является переходом первого рода и связан с переходом ионов кобальта из низкоспинового состояния в высокоспиновое. При увеличении температуры от 2 до 160 К происходит уменьшение гистерезиса в области перехода. Результаты эксперимента согласуются с проведенными DFT-расчетами.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФИ № 18-32-00644.

- [1] Q. He, Y. Guo, Magnetic phase relations of RCO_3 , IEEE Transactions on Magnetism, **51**(11), 1-4 (2015).
- [2] T. Goto, H.A. Katori, T. Sakakibara, M. Yamaguchi, Successive phase transitions in ferromagnetic YCo_3 , Physica B: Condensed Matter **177**, 255-258 (1992).

Проявления факторов бистабильности магнитной системы при ориентационных переходах в пленках феррит-гранатов

Непочатых Ю.И.¹, Коледов В.В.², Шавров В.Г.²

¹ *Донецкий физико-технический институт, Донецк, Украина*

² *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*
e-mail: nepo@bk.ru

Тонкие магнитные пленки и многослойные структуры на их основе получили широкое применение в различных СВЧ устройствах, перспективны для использования в устройствах оптоэлектроники. Свойства тонкопленочных структур, в которых изменения намагниченности имеют скачкообразный характер, представляют особый интерес. При этом существенно изменяются резонансные частоты, возможно появление новых резонансов и получение большого отклика сигнала при малом воздействии.

Бистабильность в состоянии намагниченности пленок при их подмагничивании вдоль оси трудного намагничивания (ОТН) в области значений подмагничивающего поля близких полю магнитной анизотропии приводит к появлению бифуркационного резонанса [1]. Это состояние близко ориентационному фазовому переходу, индуцируемому магнитным полем, при котором происходит завершение перехода намагниченности из угловой в коллинеарную фазу [2].

Исследовались монокристаллические пленки феррит-гранатов, полученные методом жидкофазной эпитаксии на (111)-ориентированных подложках гадолиний-галлиевого граната.

В тонких пленках железоиттриевого граната вблизи значений поля ориентационных переходов нами обнаружен и исследован новый вид автоколебаний, индуцируемых слабым ВЧ полем. Полевые зависимости магнитной восприимчивости χ (Н) исследовались с помощью автодина в диапазоне его частот $3 \div 70$ МГц. Восстанавливались зависимости от поля изменения амплитуды автодина в низкочастотном поле модуляции, которое создавалось дополнительными обмотками электромагнита [3].

В поле близком значению ее перехода в состояние насыщения перпендикулярном плоскости пленки и также направленном ВЧ поле обнаруживается спонтанная низкочастотная модуляция амплитуды автодина. Один из видов ее осциллограмм, выделенной детектированием сигнала автодина, приведен на рис.1а. Крутые фронты импульсов на нем отображают процесс высокоамплитудного движения вектора намагниченности, связанного с индуцированными ВЧ полем перескоками между близкими равновесными положениями намагниченности. Форма и частота импульсов существенно меняются в зависимости от частоты и от

амплитуды действующего ВЧ поля. На рис.1b приведена осциллограмма при таком же значении постоянного поля, но с его модуляцией $\delta H = 1 \text{ Oe}$.

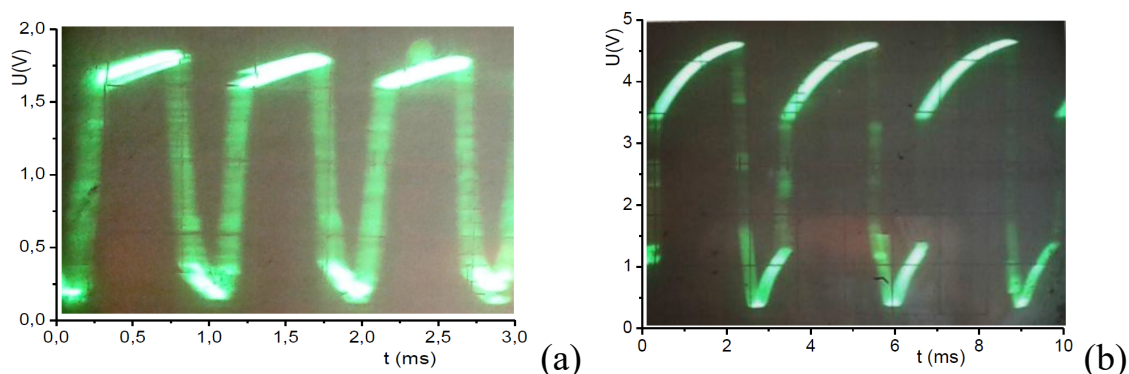


Рис.1 Осциллограммы бифуркационного резонанса индуцируемого только ВЧ полем (a) и сигнала записи $\chi(H)$ при таком же значении поля с НЧ модуляцией (b).

С такой модуляцией получены при росте и уменьшении поля кривые $\chi(H)$ на рис.2 как зависимости амплитуды $A(H)$ импульсов, что и на рис.1b, где они максимальны. В диапазонах малой восприимчивости χ (в поле $H < 1300 \text{ Oe}$ и $H > 1900 \text{ Oe}$ рис.2)

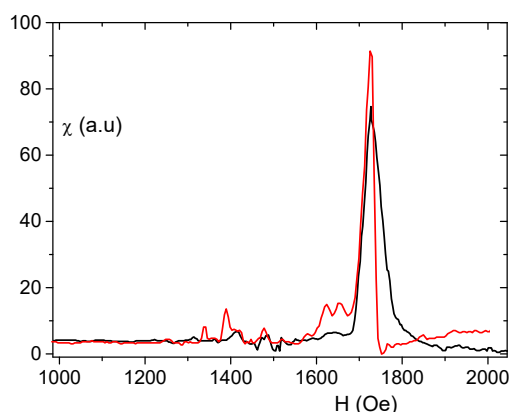


Рис.2. Запись $\chi(H)$ с НЧ модуляцией поля при отклонении поля $0,1^\circ$ от нормали к направлению кристаллической ОН.

импульсы малы и неразличимы на фоне присутствующих небольших шумовых сигналов. Бифуркационный резонанс, индуцируемый только ВЧ полем наблюдается при значениях H большого и некоторых меньших пиков на рис.2, а также в двухслойных пленках феррит-граната толщиной менее $0,3 \mu\text{m}$ в нормальном поле, близком к ее насыщению и вблизи $H=0$. Такие резонансы в нормальном

поле насыщения пленки и при $H=0$ можно связать с ориентационными фазовыми переходами в ней.

Работа выполнена в рамках госзадания при частичном финансировании РФФИ, грант 18-07-01320.

- [1] А.М. Шутый, Д.И. Семенцов. ФТТ **54**, 1302 (2012)
- [2] Белов К.П., Звездин А.К., Кадомцева А.М., Левитин Р.З. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, Москва (1977)
- [3] N.I. Mezin, Yu.I. Nepochatykh, N.Yu. Starostyuk, S.V. Yampolskii. JMMM **476**, 447 (2019)

Critical behavior of frustrated spin systems: high-loop renormalization group study

K.B.Varnashev

Saint-Petersburg State Electrotechnical University «LETI», Saint-Petersburg, Russia

e-mail: k.varnashev@mail.ru

A generalized Ginzburg-Landau-Wilson model of N -vector complex order parameter with $O(N)$ -symmetric, cubic, and "chiral" quartic interactions is considered to construct a quantitative theory of critical behavior of frustrated spin systems, including helical magnets and stacked triangular antiferromagnets [1]. For this purpose, the field-theoretical renormalization group (RG) approach at the four-loop level is applied. The perturbative expansions for RG functions, β -functions and critical exponents, are calculated both within the fixed-dimension RG technique [2] and on the basis of the ε -expansion method using dimensional regularization and the minimal subtraction scheme [3]. Corresponding series are resumed by use of the generalized Borel-Leroy transformation in combination with a conformal mapping [4] resulting in numerical estimates for the fixed point locations and the critical exponents. Our special attention is paid to calculate the marginal value of the order-parameter dimensionality separating different regimes of critical behavior. The obtained estimates are shown to rule out the possibility of continuous chiral transitions in real 3D magnets with planar or Heisenberg spins. Our conclusions agree well with the earlier RG results [5,6,7], nonperturbative considerations [8] as well as with those resulting from the Monte-Carlo simulations [9]. Finally, we compare our results with the predictions of the six-loop calculations [10].

- [1] H.Kawamura, J.Phys.: Condens. Matter **10**,4707 (1998).
- [2] G.A.Baker, J., B.G.Nickel, D.I.Meiron, Phys. Rev. B **17**, 1365 (1978).
- [3] H.Kleinert, V.Schulte-Frohlinde, Phys. Lett. B **342**, 284 (1995).
- [4] J.C.Le Guillou, J.Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **39**, 95 (1977).
- [5] S.A.Antonenko, A.I.Sokolov, Phys. Rev. B **49**, 15901 (1994).
- [6] S.A.Antonenko, A.I.Sokolov, K.B.Varnashev, Phys. Lett. A **208**, 161 (1995).
- [7] K.B.Varnashev, Preprint SPbU-IP-00-12 (2000).
- [8] M.Tissier, B. Delamotte, D.Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
- [9] M.Itakura, Preprint cond-mat/0110306 (2001).
- [10] A.Pelessetto, E.Vicari, Phys. Rep. **368**, 549 (2002).

Анизотропия обменного взаимодействия и магнитный фазовый переход в Cr_2As

А.В.Головчан¹, В.И.Вальков¹, Б.М.Тодрис¹, U. Aparajita², O.V.Roslyak³,
V.V. Koledov⁴

¹ Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина, Донецк, ДНР
e-mail: golovchan@donfti.ru

² BMCC, CUNY, New York, USA

³ Fordham University, New York, USA

⁴ Kotelnikov Institute of Radio-engineering and Electronics of RAS, 125009 Moscow, Russia

Интерметаллические соединения 3d-металлов с As или Sb, обладающие тетрагональной кристаллической структурой типа Cu_2Sb (пространственная группа симметрии $D_{4h}^7 - P4/nmm$) привлекают внимание исследователей разнообразием магнитных структур. Например, Mn_2Sb является ферромагнетиком [1], а Mn_2As [2], Fe_2As [3] и Cr_2As [4] – антиферромагнетики, различающиеся типом магнитной структуры. В этом ряду антиферромагнетик Cr_2As выделяется двумя аспектами: малыми магнитными моментами атомов ($M(\text{Cr}_I) = 0.4\mu_B$, $M(\text{Cr}_{II}) = 1.34\mu_B$ [4]) и своей магнитной структурой (рис.1b). Особенность последней состоит в том, что эффективное молекулярное поле между подсистемами Cr_I и Cr_{II} взаимокompенсируется в приближении изотропного обмена. Это должно приводить к некоррелированному упорядочению обеих подсистем, т.е. к существованию двух температур перехода.

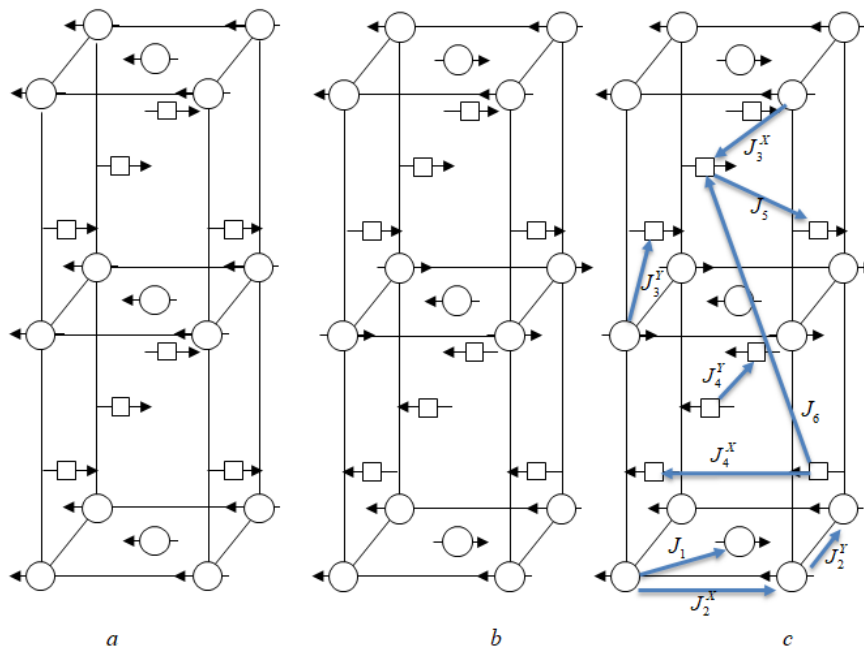


Рис.1. Магнитная структура Cr_2As : FIM(a) и AF(b). На рисунке показаны только атомы $\text{Cr}_I(\circ)$ и $\text{Cr}_{II}(\square)$. Основные обменные интегралы показаны на схеме(c).

Первоначально экспериментальные исследования обнаруживали только одну критическую температуру ($T_N=393\text{K}$) [4] из чего делался вывод о значительной величине анизотропного обменного взаимодействия $\text{Cr}_\text{I}-\text{Cr}_\text{II}$ [5]. Однако позднее, в работе [6], была обнаружена вторая критическая температура ($T_t=175\text{K}$) соответствующая упорядочению подсистемы Cr_I . Таким образом, анизотропная часть обменного взаимодействия $\text{Cr}_\text{I}-\text{Cr}_\text{II}$ не является определяющей и «эффективно работает» только в области $T_t < T < T_N$, обеспечивая индуцирование малого магнитного момента Cr_I . Исходя из вышеизложенного, представляет интерес *ab initio* расчет и последующий анализ электронной структуры и межатомных обменных интегралов в Cr_2As .

Расчеты электронной структуры и обменных интегралов в Cr_2As выполнены полностью релятивистским ККР методом (пакет программ SPRKKR[7]). Для кристаллического потенциала использовалось приближение атомных сфер. Обменно-корреляционная энергия вычислялась в приближении локальной плотности без учета градиентных поправок[8]. Базовые параметры кристаллической и магнитной структур взяты из эксперимента[4,6] ($a=3.60\text{\AA}$, $c=6.34\text{\AA}$). Атомы Cr_I занимают позиции типа $2a(0,0,0)$, Cr_II и As занимают позиции типа $2c(0,0.5,z)$ с параметрами $z_{\text{Cr}}=0.325$, $z_{\text{As}}=0.725$ соответственно.

Межатомные обменные интегралы рассчитывались по методике [9], основанной на расчете второй производной функционала полной энергии по отклонениям избранной пары спинов от положения равновесия. Эффективный спиновый гамильтониан имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} [(J_{ij}^{\text{iso}} + J_{ij}^{\text{sym}}) \vec{e}_i \vec{e}_j + D_{ij} \vec{e}_i \times \vec{e}_j],$$

где $\vec{e}_i$ - единичный вектор, указывающий направление магнитного момента на узле i , J_{ij}^{iso} и J_{ij}^{sym} - изотропная и симметричная анизотропная части обменного взаимодействия соответственно, D_{ij} - параметры описывающие взаимодействие Дзялошинского-Мория. Обменное взаимодействие, обеспечивающее связь подрешеток Cr_I и Cr_II составляет $J_3=4.2\text{ meV}$ в первой координационной сфере и быстро убывает в последующих. Отрицательное обменное взаимодействие между ближайшими атомами Cr_I ($J_1=-3.5\text{ meV}$) обеспечивает их «необычную» ориентацию в АФ структуре (в немагнитном кристалле атомы Cr_I симметрично тождественны).

Среди обменных интегралов, обеспечивающих формирование магнитного упорядочения в Cr_2As (Таблица 1) только J_6 может рассматриваться как результат непрямого двойного обмена $\text{Cr}_\text{II}-\text{As}-\text{Cr}_\text{II}$. Для прочих обменных интегралов, расстояние между катионами меньше или сравнимо с расстояниями катион-анион. Следовательно, в Cr_2As магнитная структура формируется за счет классического d-d обмена.

Таблица 1. Зависимость эффективных обменных интегралов (в meV) от магнитной структуры.				
J_{ij}	FIM	AF1	AF3	AF4
J_1	-3.52	0	5.53	5.71
J_2^X	1.81	0	3.79	2.44
J_2^Y	1.81	0	2.98	2.37
J_3^X	4.22	0	4.77	5.36
J_3^Y	4.22	0	-6.36	5.36
J_4^X	8.61	8.47	10.13	12.26
J_4^Y	8.61	8.47	8.66	9.26
J_5	0.66	2.21	1.84	-1.84
J_6	-0.32	5.67	5.18	4.20

Оценку температур магнитного упорядочения подрешеток хрома проведем по формуле[9]

$$T_i = \frac{2}{3} J_{0i},$$

справедливой для модели Гейзенберга с классическими спинами. Тут $J_{0i} = \sum_{j \neq i} J_{ij}$ - эффективное обменное взаимодействие выбранного атома со

всем кристаллом. Эффективные температуры упорядочения составляют $T(\text{Cr}_I)=180\text{K}$ и $T(\text{Cr}_{II})=382\text{K}$ против наблюдаемых экспериментально $T(\text{Cr}_I)=175\text{K}$ и $T(\text{Cr}_{II})=393\text{K}$.

В литературе имеется работа [13] посвященная теоретическому анализу методом Берто[14] возможных магнитных структур и условий их реализации в магнетиках с тетрагональной решеткой типа Cu_2Sb . Однако применимость выводов [13] к описанию AF структуры Cr_2As (в качестве определяющего параметра для существования AF структуры рис.1b указывается большая величина косвенного обмена $\text{Cr}_{II}\text{-As-Cr}_{II}$, J_6 в наших обозначениях) представляется сомнительной вследствие использованного для их получения приближения изотропного обмена. Как показал предварительный анализ магнитных структур по методу Берто[13], для реализации экспериментально наблюдаемой AF структуры в Cr_2As существование анизотропии обменного взаимодействия ($J^{\uparrow\downarrow}(\text{Cr}_I - \text{Cr}_{II}) \neq J^{\uparrow\uparrow}(\text{Cr}_I - \text{Cr}_{II})$) является необходимым условием.

Работа выполнена в рамках государственного задания при частичном финансировании РФФИ, грант № 18-07-01320.

- [1] F.J. Darnell, W.H.Cloud, H.A.Jarrett Phys.Rev. **130**, 647 (1963).
- [2] A.E.Austin, E.Adelson J.Appl.Phys. **33**, 1356 (1962).
- [3] H.Katsuraki, N.Achiwa J.Phys.Soc.Japan **21**, 2238(1966).

- [4] Y.Yamaguchi, H.Watanabe, H.Yamaguchi, S.Tomiyoshi J.Phys.Soc.Japan **32**, 958 (1972).
- [5] В.И.Вальков, Е.П.Стефановский ФТТ **34**, 49(1992).
- [6] K.Ishimoto, M.Okonogi, K.Ohoyama et.al Physica B. **213&214** , 336(1995).
- [7] The Munich SPR-KKR package, version 3.6, H. Ebert et al, <http://olymp.cup.uni-muenchen.de/ak/ebert/SPRKKR>
- [8] S.H.Vosko, L.Wilk, M.Nusair Can.J.Phys. **58**, 1200 (1980).
- [9] A.I.Liechtenstein, M.I.Katsnelson et.al JMMM **67**, 65 (1987).
- [10] M.Shirai, T.Kawamoto, K.Motizuki Int.J.Mod.Phys.B **7**, 770 (1993).
- [11] J.Tobola, S.Kaprzyk, D.Fruchart et.al. J.All.Comp. **262-263**, 65 (1997).
- [12] T.Yildirim Physica C **469**, 425 (2009).
- [13] D.Fruchart Solid State Sci. **7**, 767(2005).
- [14] A.Kaller, H.Boller, E.F.Beratut J.Phys.Chem.Solids **35**, 1139(1974).

Термодинамика и магнетизм обобщенной одномерной изинговской цепочки

Е.С. Цуварев^{1,*}, Ф.А. Кассан-Оглы^{2,**}, А.И. Прошкин^{1,2,***}

¹ Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: eginyu@mail.ru

² Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**e-mail: felix.kassan-ogly@imp.uran.ru

***e-mail: proshkin_ai@imp.uran.ru

1 Введение

Одним из самых плодотворных методов в статистической физике при решении различных задач является метод трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье [1].

Суть данного метода заключается в том, что расчет статистической суммы большого множества магнитных структур сводится к поиску максимального собственного значения некоторой простой матрицы. После чего, все термодинамические (свободная энергия, энтропия, теплоемкость) и магнитные (намагниченность, магнитная восприимчивость) величины могут быть определены простым дифференцированием по температуре или магнитному полю.

В процессе исследования модель Изинга на одномерной цепочке подвергалась разнообразным обобщениям. Учитывались обменные взаимодействия между вторыми [2, 3] и третьими соседями, одноионная анизотропия и т.п.

Однако, не смотря на сложность всех обобщений, стоит отметить, что до сих пор трансфер-матрица Крамерса-Ваннье сохранялась при переносе только на одну трансляцию решетки.

В настоящей работе рассматривается обобщение совершенно особого рода, а именно, такое, при котором в гамильтониане учитываются такие обменные взаимодействия, при которых трансфер-матрица Крамерса-Ваннье не сохраняется при переносе на одну трансляцию решетки, а инвариантна только относительно переноса на две трансляции решетки.

2 Обобщенная трансфер-матрица Крамерса-Ваннье

Рассмотрим гамильтониан с обменными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями, причем как первые, так и вторые могут быть неодинаковыми (как по величине, так и по знаку), но альтернативно чередуются через один. Гамильтониан состоит из двух пар сумм, пробегающим отдельно по четным и нечетным узлам решетки. В данном исследовании каждая сумма состоит теперь из $N/2$ слагаемых.

$$\mathcal{H}(s) = -J_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+1} - J_2 \sum_{j=2,4,6,\dots}^N s_j s_{j+1} - J'_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+2} - J'_2 \sum_{j=2,4,6,\dots}^N s_j s_{j+2} - H \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

где J_1, J_2 - взаимодействия между ближайшими соседями, J'_1, J'_2 - взаимодействия между вторыми соседями, H - внешнее магнитное поле, $s = \pm 1$.

Рисунок 1 иллюстрирует одномерную решетку спинов, соответствующую предлагаемой обобщенной модели Изинга, описываемой гамильтонианом (1).

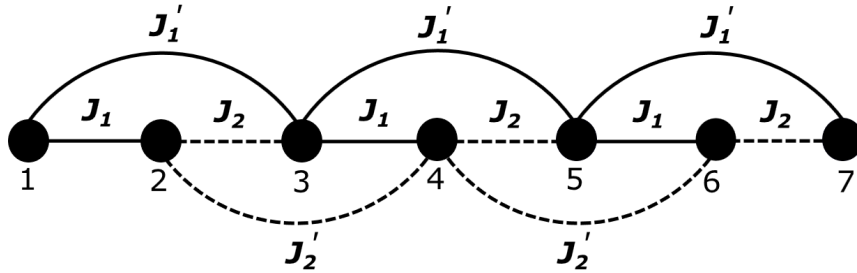


Рис. 1 Решетка обобщенной модели Изинга с учетом ближайших и вторых соседей.

Следуя алгоритму вывода трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье, получаем выражение для трансфер-матрицы рассматриваемой обобщенной модели (1):

$$V = \begin{pmatrix} e^{K_1+L_1+K_2+L_2+h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2+h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2+h} & e^{K_1-L_1-K_2-L_2+h} \\ e^{-K_1+L_1-K_2-L_2+h} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2+h} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2+h} & e^{-K_1-L_1+K_2+L_2+h} \\ e^{-K_1-L_1+K_2+L_2-h} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2-h} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2-h} & e^{-K_1+L_1-K_2-L_2-h} \\ e^{K_1-L_1-K_2-L_2-h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2-h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2-h} & e^{K_1+L_1+K_2+L_2-h} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $K_1 = J_1/T, L_1 = J'_1/T, K_2 = J_2/T, L_2 = J'_2/T, h = H/T$.

Собственные значения матрицы V вычисляются из секулярного уравнения:

$$\det(V - \lambda I) = 0. \quad (3)$$

или

$$\lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0. \quad (4)$$

В рассматриваемом методе трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье все термодинамические и магнитные величины исследуемой модели выражаются только через ее максимальное собственное значение λ_{max} . Для этих целей, в том числе, и для изучения фрустрационных свойств модели, в данной работе нам потребуются явные выражения, зависящие от температуры, четырех обменных параметров и магнитного поля, для энтропии S , теплоемкости C и намагниченности M .

Прежде всего, принимая во внимание то, что в гамильтониане (1) каждая сумма пробегает только по половине узлов, а не по всем узлам решетки, статсумма в термодинамическом пределе принимает вид:

$$Z_N = \lambda_{max}^{N/2}. \quad (5)$$

Тогда формулы для свободной энергии, энтропии, теплоемкости и намагниченности (на один узел решетки) можно записать как:

$$F(H, T) = -\frac{T \ln \lambda_{max}}{2}. \quad (6)$$

$$S(H, T) = \frac{\ln \lambda_{max}}{2} + \frac{T}{2\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \quad (7)$$

$$C(H, T) = \frac{T}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} + \frac{T^2}{2} \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \quad (8)$$

$$M(H, T) = \frac{T}{2\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial H}. \quad (9)$$

3 Термодинамика обобщенной модели Изинга

В процессе исследования термодинамических и магнитных свойств обобщенной модели Изинга было установлено, что в основном состоянии реализуется только семь типов магнитных упорядочений (структур). К ним относятся: ферромагнитная структура f , соответствующая сохранению

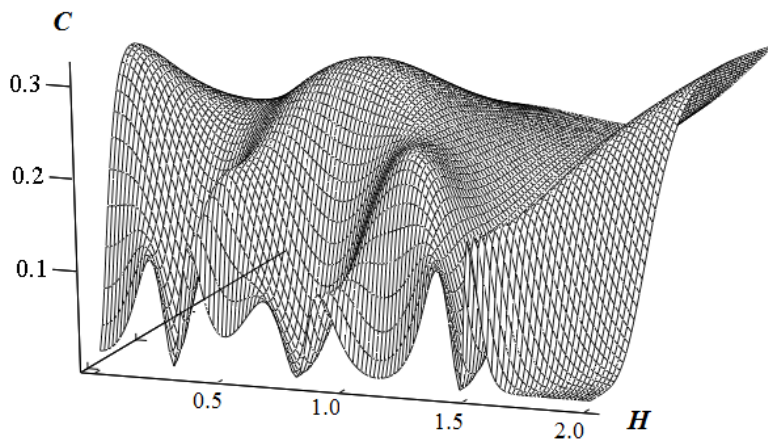


Рис. 2 Теплоемкость обобщенной модели Изинга для конкурирующих взаимодействий.

периода трансляций решетки с внутренней энергией $E_f = -(J_1 + J_2 + J'_1 + J'_2)/2 - H$, структура с удвоением периода трансляций решетки af имеет энергию $E_{af} = (J_1 + J_2 - J'_1 - J'_2)/2$, четыре структуры с учетверением периода трансляций $aaff, faaf, ffaf$ и $fffa$ с энергиями $E_{aaff} = (J'_1 + J'_2 - J_1 + J_2)/2$, $E_{faaf} = (J'_1 + J'_2 + J_1 - J_2)/2$,

$E_{ffaf} = (J'_1 - J'_2)/2 - H/2$, $E_{fffa} = (J'_1 - J'_2)/2 - H/2$ соответственно. А также магнитная структура с утроением периода трансляций ffa с энергией $E_{ffa} = (J_1 + J_2 + J'_1 + J'_2)/6 - H/3$. На рисунке 2 продемонстрирован трехмерный график теплоемкости обобщенной модели Изинга.

Замечено, что в точках множественного схождения фаз нуль-температурная энтропия не равна нулю. В этих точках, помимо сходящихся фаз, сосуществуют бесконечное множество фаз без какой-либо трансляционной инвариантности. В термодинамике давно наблюдались тройные точки и Смолуховский [4] был первым, кто обратил внимание, что в тройной точке, кроме сходящихся фаз, сосуществует бесконечное множество флуктуаций плотности. Таким образом, наблюдается полная аналогия между тройными точками в магнитной системе и в термодинамике жидкостей.

Более того, обнаружена аналогия между явлением, при котором наблюдается существование одной фазы в области другой фазы, и наоборот, существование первой фазы в области второй, с такими известными явлениями из термодинамики, как переохлаждение и перегрев.

Из рисунка 3 видно, что в обобщенной модели Изинга намагниченность может иметь вплоть до трех скачков.

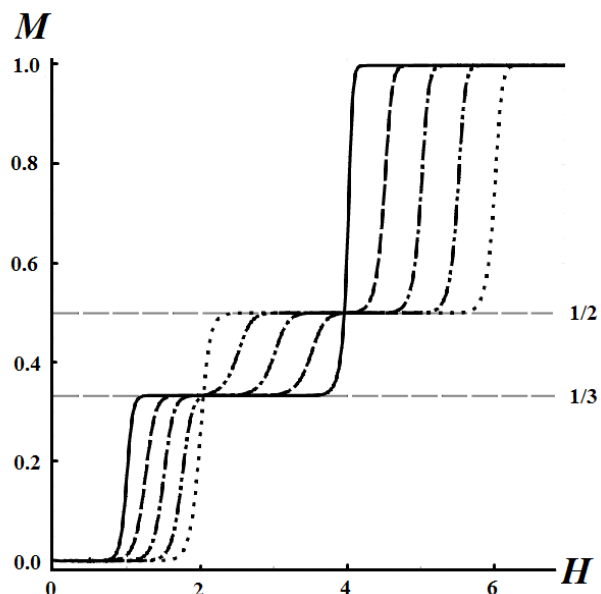


Рис. 3 Намагниченность обобщенной модели Изинга для конкурирующих взаимодействий.

4 Заключение

Получено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга в магнитном поле. Выведен ряд точных выражений для нуль-температурных энтропий как в отсутствие, так и при наличии магнитного поля, а также найдены значения нуль-температурных намагниченностей во фрустрирующих полях. Изучено поведение энтропии, теплоемкости и намагниченности в точках фрустраций, а также в непосредственной близости от них. Получено явление аналогичное явлениям перегрева и переохлаждения, известные из термодинамики. А также, замечено качественное совпадение с явлением критической опалесценции.

[1] H.A. Kramers, G.H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252–262 (1941).

[2] J.F. Dobson, J. Math. Phys. **10**, 40-45 (1969).

[3] F.A. Kassan-Ogly, Phase Transitions **74**, 353-365 (2001).

[4] M. Smoluchowski, Acad. des Sci. de Cracovie Annalen der Physik **25**, 205 (1907).

Теплоемкость и магнитокалорический эффект в манганите $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.02, 0.05, 0.10$)

А.Б. Гаджиев¹, А.Г. Гамзатов¹, А. М. Алиев¹, S. Dwi Nanto², Budhy Kurniawan³, C. Yu⁴

¹Институт Физики им. Х. И. Амирханова, ДФИЦ РАН, Махачкала, 367015, Россия

²Syarif Hidayatullah States Islamic University, Jakarta 15412, Indonesia

³Physics department, Universities Indonesia, 15412, Indonesia

⁴Ulsan National Institute of Science and Technology, Ulsan, 44919, South Korea

E-mail: mr.gadzhiev.93@mail.ru

Исследования магнитных материалов с гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ) в области комнатных температур остаётся одной из актуальных задач в области магнитного охлаждения как с фундаментальной точки зрения, так и для практического применения. Манганиты считались одними из перспективных магнитокалорических материалов, что делает их потенциальными кандидатами для использования в технологии магнитного охлаждения [1,2]. Исследование последних лет направлены на поиски новых композиций и методов улучшения магнитокалорических свойств манганитов. В этом направлении достигнуты определенные успехи, и предлагаются различные способы для улучшения магнитокалорических свойств манганитов (изготовление композитов, напыление на поверхность магнитомягкую пленку и т.д.) [3-5]. Еще одним из методов позволяющий улучшить магнитокалорические свойства, это синтез(получение) образцов со смешанным замещением, как в А подрешетке, так и в подрешетке Mn [6-8]. Поскольку в этих сериях манганитов замещаются ионы в разных узлах решетки, соответственно разными будут характер процессов рассеяния носителей тепла и заряда, что будет сказываться на температурных зависимостях исследуемых параметров. Все это позволяет управлять физическими свойствами манганитов.

В данной работе представлены результаты исследования температурной зависимости теплоемкости и магнитокалорического эффекта в манганите $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x=0, 0.02, 0.05, 0.10$) в температурном интервале 80-400 К и в магнитных полях до 1.8 Т.

На температурной зависимости теплоемкости для всех образцов наблюдаются аномалии вблизи фазовых переходов. Для наглядности кривые смещены относительно друг друга. Как видно из рисунка, теплоемкость для всех образцов подчиняется Дебаевским представлениям о теплоемкости твердых тел, за исключением ярко выраженных аномалий связанных с фазовым переходом ферромагнетик-парамагнетик. Как видим из рис.1, частичное замещение Sr барием приводит к смещению T_C в сторону низких температур. Так для образца $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ ($x=0$) $T_C=362$ К,

а для образца $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{Ba}_{0.1}\text{MnO}_3$ ($x=0.1$) $T_C=280$ К, т.е. допирование приводит к смещению T_C на 82 К.

Прямые измерения адиабатического изменения температуры ΔT_{ad} проводились модуляционным методом [9]. К образцу прикладывается переменное магнитное поле, которое, благодаря магнитокалорическому эффекту, индуцирует периодическое изменение температуры образца. Это изменение температуры регистрируется синхронным детектором посредством дифференциальной термопары, один спай которой приклеен к исследуемому образцу. Частота переменного магнитного поля в данном эксперименте составляла 0.3 Hz. Переменное магнитное поле 18 кОе создавалось источником постоянного магнитного поля производства фирмы AMT&C LLC. Данная методика позволяет регистрировать изменение температуры с точностью не хуже 10^{-3} К [9].

Как видим из рисунка 2, с ростом концентрации Ва, температура

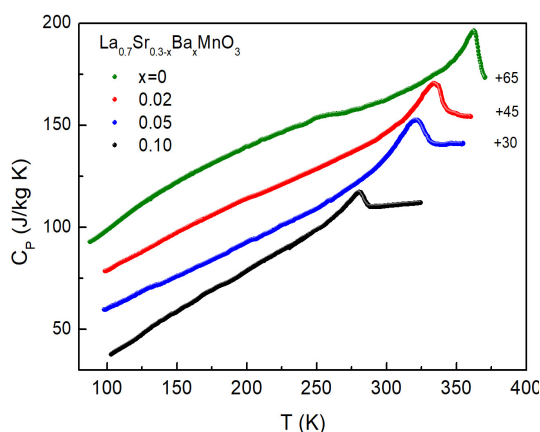


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.02, 0.05, 0.10$) в магнитном поле 1.8 Т.

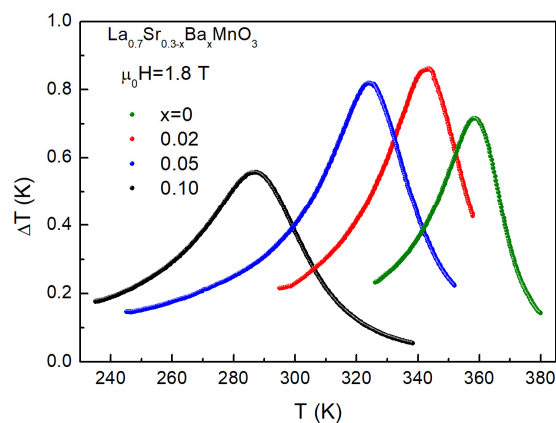


Рис.2. Температурная зависимость МКЭ для $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0, 0.02, 0.05, 0.10$) в магнитном поле 1.8 Т.

максимума эффекта смещается в сторону низких температур, что хорошо согласуется с данными теплоемкости (рис.1). Максимальная величина прямого эффекта в поле 1.8 Т равна $\Delta T=0.86$ К и наблюдается для образца $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.28}\text{Ba}_{0.02}\text{MnO}_3$ при $T=343$ К.

Следует отметить, для образцов с $x=0, 0.02$ и 0.05 величина МКЭ слабо меняется с допированием, и колеблется в пределах $\Delta T \sim 0.8$ К. При этом T_C смещается более чем на 40 К. Это означает, что путем регулирования уровня замещения можно управлять T_C в широкой области температур, при этом величина МКЭ остается практически неизменной, что является важным преимуществом для магнитокалорических материалов. Аналогичное поведение обнаружено авторами [7, 8, 10].

Работа выполнена в рамках государственного задания Федерального агентства по научным организациям (ФАНО России) № 0203-2016-0009 и частично поддержана РФФИ, исследовательский проект № 17-02-01195.

Список литературы

- [1] M. H. Phan, S. C. Yu, J. Magn. Magn. Mater. **308**, 325 (2007).
- [2] V. Markovich, A. Wisniewski, H. Szymczak, Magnetic Properties of Perovskite Manganites and Their Modifications, *Handbook of Magnetic Materials*, Edited by K.H.J. Buschow, **22**, 1-201 (2014).
- [3] M. Pekala, K. Pekala, V. Drozd, K. Staszkievicz, J.-F. Fagnard, and P. Vanderbemden, Journal of Applied Physics, **112**, 023906 (2012).
- [4] A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov, G.G. Ramazanova, L.G. Nevruzova, Phase Transitions, **87**, 305. (2014).
- [5] A.G. Gamzatov, A.M. Aliev, A.R. Kaul, Journal of Alloys and Compounds, **710**, 292-296. (2017).
- [6] A.G. Gamzatov, A.B. Batdalov, A.M. Aliev, Z. Khurshilova, M. Ellouze, F. Ben Jemma, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **443**, 352–357 (2017).
- [7] A.B. Batdalov, A.G. Gamzatov, A.M. Aliev, N.A. bdulkadirova, P.D.H. Yen, T.D. Thanh, N.T. Dung, S.-C. Yu Journal of Alloys and Compounds **782** (2019) 729-734.
- [8] A.G. Gamzatov, A.M. Aliev, P.D.H. Yen, K.X. Hau Kh. E. Kamaludinov, T.D. Thanh, N.T. Dung, S.-C. Yu, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **474** (2019) 477–481
- [9] А.М. Алиев, А.Б. Батдалов, В.С. Калитка. Письма в ЖЭТФ **90**, 736 (2009).
- [10] M. Zarifi, P. Kameli, M. Mansouri, H. Ahmadvand, H. Salamatia Solid State Communications **262** (2017) 20–28

Влияние высокого давления на электронный транспорт в области собственной проводимости в системе p -CdSb-NiSb

Р.Г.Джамамедов¹, Т.Р.Арсланов¹, В.С.Захвалинский²

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

e-mail: rdzhamamedov@yahoo.com

² Белгородский государственный национальный исследовательский университет (БелГУ) Белгород, Россия

e-mail: v_zaxval@mail.ru

Интерметаллические соединения на основе антимонида кадмия, CdSb, демонстрируют уникальные полупроводниковые свойства, которые представляют интерес для технологий термоэлектрического охлаждения и выработки энергии. CdSb кристаллизуется в орторомбическую структуру $Pbca$ (структура типа Be), и следовательно, электронный транспорт обладает выраженной анизотропией. С точки зрения электронной структуры CdSb - узкозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны $E_g \sim 0.46$ эВ при 297 К [1]. Как и большинство полупроводниковых соединений группы II–V, нелегированный антимонид кадмия обладает p -типом проводимости. Кристаллы n -типа могут быть получены путем легирования In, Pb и т.д.

В случае легирования CdSb переходными металлами (Ni, Fe, Mn и т.д.) отмечается, что p -тип проводимости сохраняется, так как эти примеси выступают в качестве акцепторов в замещенной структуре полупроводника и результат такой растворимости демонстрируют диамагнитный отклик магнитной восприимчивости [2]. Недавно было показано, что легирование Ni исходного соединения CdSb приводит к образованию игольчатой структуры (*needle-like*) NiSb в матрице CdSb, что приводит к реализации ферромагнитного состояния с $T_C > 300$ К [3] и прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка ($\sim \exp[T_0/T]^p$) Моттовского ($p=1/4$) и Эфроса-Шкловского типа ($p=1/2$) [4]. В частности, было установлено, что в области перехода металл-изолятор при $T \sim 20$ К, поведение того или иного режима проводимости сильно коррелирует с концентрацией магнитной примеси. Несмотря на то, что авторами работы [4] было выполнено детальное изучение транспортных и магнетотранспортных параметров в CdSb:Ni ниже 300 К, вопрос о влиянии примеси Ni на фундаментальную энергетическую щель остается открытым. В настоящей работе, нами приводится исследование температурной зависимости удельного сопротивления системы CdSb-NiSb в области собственной проводимости при высоком давлении $P < 6$ ГПа с целью формирования представления о поведении E_g и влиянии структурного превращения на электронный транспорт. Исследования выполнялись на монокристаллических образцах p -CdSb-NiSb

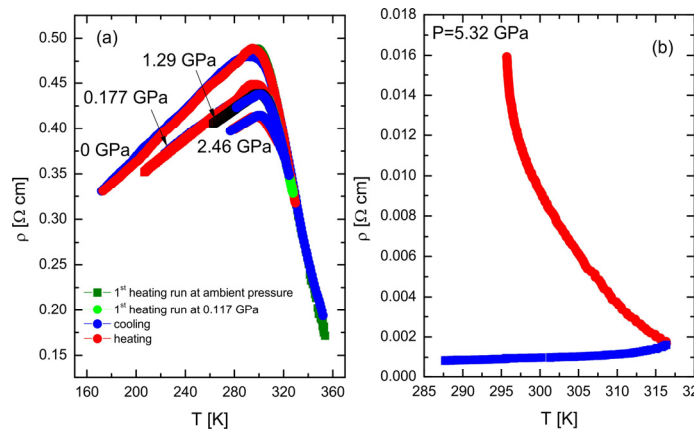


Рис.1. Температурная зависимость удельного сопротивления при различных давлениях для CdSb-NiSb.

из титана и ВК-5 вставки для низкотемпературных измерений. Все измерения проводились с первичным нагревом выше 293 К, охлаждением и последующим нагревом образца. При атмосферном давлении зависимость $\rho(T)$ демонстрирует максимум при $T \sim 295$ К (рис 1а), который начинает смещаться в область высоких температур с приложением давления, свидетельствуя о положительном знаке барического коэффициента dT/dP со средним темпом ~ 3.88 К/ГПа. При давлении 5.23 ГПа (рис. 1б) преобладает существенное понижение удельного сопротивления, ассоциируемое со структурным превращением. Необычность подобного превращения заключается в том, в результате структурного перехода в новой фазе сохраняется активационный тип проводимости (малых энергий) только при нагреве, а с охлаждением преобладает полуметаллическое поведение полупроводника. Как известно, соединение CdSb, демонстрирует ряд уникальных превращение под давлением, включая фазовые превращения, новые фазовые образования, барическое разложение и аморфизацию после

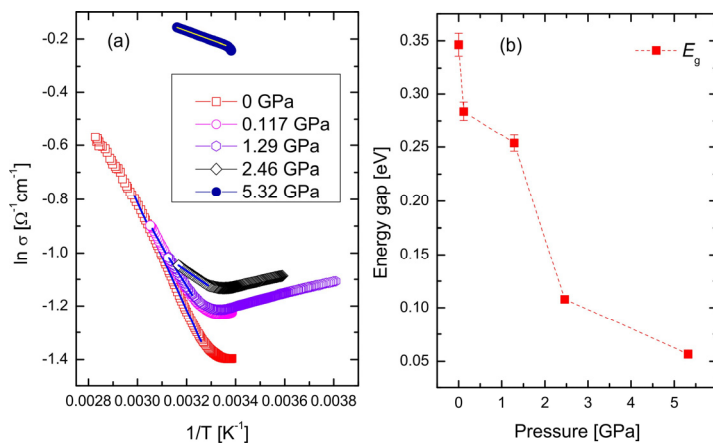


Рис.2. (а) Зависимость обратной температуры от $\ln$ удельной проводимости при различных давлениях. (б) Зависимость E_g от давления

с концентрацией Ni ~ 0.05 at % и ориентацией NiSb игл - кластеров (длина 30 - 40 мкм и диаметр 1 - 1.5 мкм) вдоль направления роста слитка.

На рисунке 1 показаны температурные зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ при давлениях до 2.46 ГПа (а) и 5.23 ГПа (б), измеренные в установке высокого давления Торойд с использованием

оппозиционных наковален из титана и ВК-5 вставки для низкотемпературных измерений. Все измерения проводились с первичным нагревом выше 293 К, охлаждением и последующим нагревом образца. При атмосферном давлении зависимость $\rho(T)$ демонстрирует максимум при $T \sim 295$ К (рис 1а), который начинает смещаться в область высоких температур с приложением давления, свидетельствуя о положительном знаке барического коэффициента dT/dP со средним темпом ~ 3.88 К/ГПа. При давлении 5.23 ГПа (рис. 1б) преобладает существенное понижение удельного сопротивления, ассоциируемое со структурным превращением. Необычность подобного превращения заключается в том, в результате структурного перехода в новой фазе сохраняется активационный тип проводимости (малых энергий) только при нагреве, а с охлаждением преобладает полуметаллическое поведение полупроводника. Как известно, соединение CdSb, демонстрирует ряд уникальных превращение под давлением, включая фазовые превращения, новые фазовые образования, барическое разложение и аморфизацию после декомпрессии [5]. Таким образом, наблюдаемое поведение в области высокого давления можно трактовать как механизм барического разложения Sb+Cd, т.е. необратимым фазовым превращением при охлаждении после первичного нагрева образца.

Для определения зависимости ширины запрещенной зоны E_g от

давления на рис. 2а выделена высокотемпературная область удельной проводимости $\sigma=1/\rho$ как функция $1/T$. Здесь линейные участки (прямые линии на рисунке) соответствуют активационному закону $\sigma=\sigma_0\exp(E_g/2k_B T)$, откуда далее на рис 2b показана зависимость $E_g(P)$. Экспериментально определенная $E_g=0.35$ эВ при $P=0$ ГПа для CdSb-NiSb, что значительно ниже значения чистого CdSb (0.46 эВ) [1]. Как можно видеть с приложением давления зависимость $E_g(P)$ демонстрирует почти монотонное убывание, достигая значения 0.05 эВ при $P=5.23$ ГПа.

Из прямых структурных исследований, выполненных в работе [5], а также данным по эффекту Холла под давлением (наши результаты), предлагается, что фазы высокого давления для орторомбической структуры CdSb должны быть металлизированы. Кроме того, барического разложение полупроводникового стехиометрического состава протекает с образованием аморфной фазы металлической проводимости и избытка Cd. Исходя из данных соображений, структурный переход в металлизированную фазу высокого давления ($P=5.23$ ГПа) тогда должен приводить к $E_g \rightarrow 0$, т.е. перекрытию потолка валентной зоны с дном зонной проводимости. Однако, преобладание низкоэнергетической ширины запрещенной зоны с 0.05 эВ может указывать, как на механизм зонной перестройки, связанный с переходом от не прямозонной к прямозонной E_g , так и формирования топологического полуметаллического состояния в сжатом CdSb-NiSb. Данный аспект требует дальнейшего детального изучения.

- [1] W.J.Turner, A.S.Fischler, and W.E.Reese, Phys. Rev. **121**, 759 (1961).
- [2] M.Matyáš, M.Klígl, Czech. J. Phys. B **18**(3), 376-381 (1968).
- [3] R. Laiho, A.V.Lashkul, E.Lähderanta, K.G.Lisunov, I.Ojala, V.S.Zakhvalinski, JMMM, **300**, e8-e11 (2006).
- [4] R. Laiho, A.V.Lashkul, K.G.Lisunov, E.Lähderanta, M.A. Shakhov, and V.S.Zakhvalinski, J. Phys.: Condens. Matter **20** 295204 (8pp) (2008).
- [5] V.F.Degtyareva, O.Degtyareva, H.Mao, and R.J.Hemley, Phys. Rev. B **73**, 214108 (2006).

АВТОРСКИЙ СПИСОК

A			И		
Aparajita U.	55		Исаева М.М.	43	
K			K		
Koledov V.V.	55		Кадыров Л.С.	37	
Kurniawan B.	63		Каманцев А.П.	24	
N			Каракозов А.Е.	37	
Nanto S.D.	63		Карпенков А.Ю.	17	
R			Кассан-Оглы Ф.А.	59	
Roslyak O.V.	55		Кирик Н.П.	41	
V			Князев Ю.В.	41	
Varnashev K.B.	54		Коледов В.В.	6, 24, 52	
Y			Котов Л.Н.	26	
Yu C.	63		Котова Е.Л.	26	
A			Кошкидько Ю.С.	24	
Алиев А.М.	63		M		
Андреев А.В.	51		Магницкая М.В.	37	
Аншиц А.Г.	41		Макурenkova A.A.	17	
Арсланов Т.Р.	66		Маширов А.В.	24	
B			Митюк В.И.	6	
Барташевич М.И.	51		Михайлова А.Б.	10	
Баюков О.А.	41		Михалев К.Н.	35	
Болдырев К.Н.	30, 33		Молчанова А.Д.	30	
Бучельников В.Д.	47		Молчанова А.Д.	33	
B			Муртазаев А.К.	12	
Вальков В.И.	6, 55		H		
Верховский С.В.	35		Незнахин Д.С.	51	
Волкова З.Н.	35		Непочатых Ю.И.	52	
G			Никитин С.А.	17	
Гаджиев А.Б.	63		O		
Гамзатов А.Г.	63		Орлова Т.С.	21	
Ганин М.А.	10		P		
Геращенко А.П.	35		Павлухина О.О.	47	
Гермов А.Ю.	35		Панкратов Н.Ю.	17	
Головчан А.В.	6, 55		Пауков М.А.	14	
Горбунов Д.И.	51		Пауков М.А.	17	
Горшунов Б.П.	37		Петраков А.П.	26	
Гудин С.А.	15		Писарев Р.В.	30	
D			Политова Г.А.	10	
Джамамедов Р.Г.	66		Попов В.В.	21	
Дильмиева Э.Т.	24		Попова М.Н.	30	
3			Прошкин А.И.	59	
Загребин М.А.	47		P		
Захвалинский В.С.	66		Рабчевский Е.В.	41	
			Радзивончик Д.И.	51	

	<i>С</i>	
Северин П.А.		26
Соколовский В.В.		47
Солин Н.И.		15
	<i>Т</i>	
Тааев Т.А.		12, 43, 45
Терешина И.С.		17
Тодрис Б.М.		6, 55
	<i>Ф</i>	
Филимонов А.В.		10

	<i>Х</i>	
Хизриев К.Ш.		12
Хизриев Ш.К.		45
	<i>Ц</i>	
Цвик Я.		24
Цуварев Е.С.		59
	<i>Ш</i>	
Шавров В.Г.		24, 26, 52
Шишкина Н.Н.		41