

ĐIỀU HƯỚNG TỪ TRONG HỢP CHẤT $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$

NGUYỄN HOÀNG LƯƠNG, NGUYỄN PHÚ THÁI

Hợp chất RFe_{11}Ti (R = kim loại đất hiếm) được quan tâm nghiên cứu vì chúng có thể được dùng làm nam châm vĩnh cửu. Người ta dự đoán trong cấu trúc RFe_{11}Ti đất hiếm có thửa số Stevens $\alpha_J > 0$ ($\text{R} = \text{Sm}, \text{Er}, \text{Tm}$ và Yb) phân mảng đất hiếm sẽ đơn trực như trong các cấu trúc đất hiếm - kim loại chuyển tiếp khác. Bởi vì phân trong RFe_{11}Ti cũng có dí hướng đơn trực nên sẽ không có chuyển pha tái định hướng hợp chất này. Tuy nhiên, điều ngạc nhiên là hiện tượng tái định hướng spin đã quan sát được ở $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$, ở nhiệt độ $T_s = 65^\circ\text{K}$ [1].

Để giải thích hiện tượng này, chúng tôi đã tính năng lượng dí hướng từ của phân hiềm trong hợp chất $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$ xuất phát từ Hamiltonian sau:

$$H = H_{CF} + H_{ex}$$

trong đó

$$H_{CF} = B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0 + B_6^0 O_6^0$$

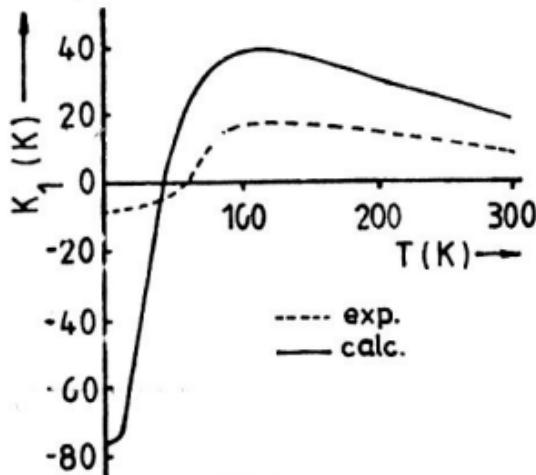
là Hamiltonian trường tinh thể với B_m là các thông số trường tinh thể và O_n^m là các toán tử Stevens;

$$H_{ex} = \alpha_J \mu_B J \vec{H}_m$$

là Hamiltonian trường trao đổi với g_J là thửa số Landé, J là momen toàn phần và \vec{H}_m phân tử tác động lên ion đất hiếm. Hằng số dí hướng từ K_1^R của phân mảng đất hiếm B_n^m và O_n^m bới biểu thức [2]:

$$K_1^R = -\frac{3}{2} B_2^0 \langle O_2^0 \rangle - 5 B_4^0 \langle O_4^0 \rangle - \frac{21}{2} B_6^0 \langle O_6^0 \rangle$$

trong đó $\langle O_n^m \rangle$ là trung bình nhiệt của toán tử Stevens.



Hình 1

Sự phụ thuộc nhiệt độ của hằng số dí hướng từ K_1 trong $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$. Đường rẽ nét là kết quả của Andreev và ctv [1], đường liền nét là kết quả tính toán.

phụ thuộc nhiệt độ của hằng số dị hướng của phân mảng K_1^{Br} trong $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$ được cho (4) sử dụng Hamiltonian (1). Kết hợp kết quả nhận được với giá trị hằng số dị hướng của mảng sắt K_1^{Fe} lấy từ thực nghiệm [3], có thể tính được hằng số dị hướng tổng cộng $K_1^{Er} + K_1^{Fe}$ trong $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$ và nhiệt độ tái định hướng spin T_s là nhiệt độ tại đó K_1^{Br} và K_1^{Fe} bằng nhau. Giá trị B_n^n và $g_J\mu_B H_m$ được chọn để thu được giá trị T_s phù hợp với thực

nh 1 biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của hằng số dị hướng tổng cộng K_1 thu được trong ản. Nhận thấy kết quả tính toán phù hợp tốt với K_1 do bằng thực nghiệm trên mẫu đơn ẽ bởi Andreev và ctv [1].

vùng nhiệt độ rất thấp có sự sai khác vì Andreev và ctv [1] đã dùng phương pháp Sucksmith pson để phân tích kết quả thực nghiệm. Như đã chỉ ra bởi Radwanski và Franse [6], phương ẽ cho giá trị năng lượng dị hướng nhỏ hơn nhiều so với thực tế. Do đó kết quả chúng tôi ẽ là hợp lý. Các thông số tính toán và giá trị T_s được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1

Thông số trường tinh thể B_n^n , trường trao đổi $g_J\mu_B H_m$
và nhiệt độ tái định hướng spin T_s trong $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$

K)	$B_4^n(K)$	$B_6^n(K)$	$g_J\mu_B H_m(K)$	$T_s(K)$
10^{-2}	-3×10^{-4}	$1,4 \times 10^{-5}$	80	45 (bài này) 50 (thực nghiệm [4]) 90 - - - - - [3, 5] 60 - - - - - [1]

c tính toán của chúng tôi chỉ ra rằng các giá trị lớn đáng kể của các thông số bậc cao của = (4, 6) (trong bảng 1) đã quyết định đặc tính phụ thuộc nhiệt độ phức tạp của dị hướng ion đất hiếm và dẫn đến hiện tượng tái định hướng spin trong $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$. Nhận xét này ẽ hợp với các kết luận gần đây của nhiều tác giả về nguyên nhân của hiện tượng tái định spin phức tạp trong $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- V. Andreev, V. Sechovsky, N. V. Kudrevatykh, S. S. Sigaev, E. N. Tasarov. J. Less-Common
metals 144, L21, (1988).
A. Lingard, O. Danielson. Phys. Rev. B11, 351 (1975).
P. Hu, N. Z. Li, J. P. Gavigan, J. M. D. Coey. J. Phys. Condens. Matter 1, 755 (1989).
K. Sinlu, S. K. Malik, D. T. Adroja, J. Elbicki, S. G. Sankar, W. E. Wallace. J. Magn. Magn.
mat. 80, 251 (1989).
C. Yang, L. S. Kong, Y. B. Zhu, H. Sun, X. D. Pei, J. Phys C8-49, 543 (1988).
J. Radwanski, J. J. M. Franse. Phys. Rev. B36, 2616 (1987).

Hoang Luong, Nguyen Phu Thuy - MAGNETIC ANISOTROPY IN $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$
COMPOUND

Temperature dependence of the anisotropy constant of the Er-Sublattice in $\text{ErFe}_{11}\text{Ti}$ compound has been calculated by using an exchange field plus crystal field Hamiltonian. The obtained results show the important role of the high order crystal field parameters B_n^n ($n=4,6$) in the spin reorientation phenomenon.

đóng thi nghiệm VLNDT - ĐHTH Hà nội

Nhận ngày 20.3.1990