

取向 $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 与 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 多晶磁化曲线的计算*

闫 羽 金汉民

(吉林大学物理系, 长春 130012)

(1999 年 10 月 15 日收到; 1999 年 12 月 1 日收到修改稿)

基于单离子晶场模型, 提出了计算稀土- Fd (Co)金属间化合物取向多晶样品磁化曲线的方法. 用此方法计算了取向 $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 和 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 多晶的高场磁化曲线, 计算中使用了拟合化合物单晶磁化曲线得到的交换场与晶场参数. 计算曲线与实验曲线相符合.

关键词: 磁化曲线, 晶场, $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$

PACC: 7550B, 7530G

1 引 言

稀土(R)- Fd (Co)金属间化合物中稀土晶格的磁各向异性来源于晶场作用, 因此准确地确定化合物的晶场参数, 对于了解其磁各向异性很重要. 以前人们都是从化合物的单晶磁化曲线确定晶场参数^[1-3]. 许多类化合物(如 $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{C}$, $\text{R}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ 和 $\text{R}(\text{FeM})_{12}\text{N}_x$ ($\text{M}:\text{Mo}, \text{Ti}, \dots$)等)没有单晶样品, 只有多晶样品的磁化曲线, 对这些化合物的晶场参数还未详细系统地研究. 本文基于单离子晶场模型, 假设晶粒的 c 轴绕取向方向(A. D.)按高斯函数分布, 用拟合 $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 和 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 单晶磁化曲线^[4,5]得

$$M_{//} = \frac{\int_{\theta_c=0}^{\pi/2} \int_{\delta_c=0}^{\pi/2} M_s \sin\theta_c (-\sin\theta \sin\theta_c \cos(\varphi + \delta_c) + \cos\theta \cos\theta_c) \exp\left(-\frac{\theta_c^2}{2\theta_0^2}\right) d\theta_c d\delta_c}{\int_{\theta_c=0}^{\pi/2} \int_{\delta_c=0}^{\pi/2} \sin\theta_c \exp\left(-\frac{\theta_c^2}{2\theta_0^2}\right) d\theta_c d\delta_c}, \quad (1)$$

$$M_{\perp} = \frac{\int_{\theta_c=0}^{\pi/2} \int_{\varphi_c=0}^{\pi} \int_{\delta_c=0}^{\pi/2} M_s \sin\theta_c (\sin\theta \mu(\theta_c, \varphi_c, \delta_c, \varphi) + \cos\theta \sin\theta_c \cos\varphi_c) \exp\left(-\frac{\theta_c^2}{2\theta_0^2}\right) d\theta_c d\varphi_c d\delta_c}{\int_{\theta_c=0}^{\pi/2} \int_{\varphi_c=0}^{\pi} \int_{\delta_c=0}^{\pi/2} \sin\theta_c \exp\left(-\frac{\theta_c^2}{2\theta_0^2}\right) d\theta_c d\varphi_c d\delta_c}, \quad (2)$$

$$\mu(\theta_c, \varphi_c, \delta_c, \varphi) = \cos\theta_c \cos\varphi_c \cos(\varphi + \delta_c) - \sin\varphi_c \sin(\delta_c + \varphi),$$

其中 $(\theta_c, \varphi_c, \delta_c)$ 为晶粒 i 的 100 坐标系 $x'y'z'$ (z' 轴平行于晶粒的 [001] 轴) 在 xyz 坐标系中的角度, (θ, φ) 为晶粒 i 的磁化强度 M_s 在 $x'y'z'$ 坐标系中的方位角, θ_0 为取向参数, 由剩余磁化强度的比值 $M_{//}(H=0)/M_{\perp}(H=0)$ 来确定^[6,7], 对 $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$

到的交换场与晶场参数, 计算了化合物取向多晶样品的高场磁化曲线. 计算曲线与实验曲线符合, 从而说明了这种方法的正确性.

2 模型与计算方法

取向多晶化合物包含 N 个晶粒, 晶粒间无相互作用. 化合物的总能量 E 为 N 个晶粒的自由能之和, 即 $E = \sum_{i=1}^N E_i$. 设晶粒的 c 轴绕取向方向按高斯函数分布, 则在取向方向为 z 轴的 xyz 坐标系中(如图 1 所示), 化合物沿取向方向(z 轴)和垂直于取向方向(x 轴)的磁化强度分别为

和 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, θ_0 分别为 17.4° 和 12.5° .

忽略 f 和 g 晶位的差别, $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 中有两个磁不等价晶位: $\text{R}(1)$ 和 $\text{R}(2)$. 在 $x'y'z'$ 坐标系中, 晶粒 i ($\theta_c, \varphi_c, \delta_c$) ($i=1, 2, \dots, N$) 的两个磁不等价晶位的稀土离子 R^{3+} ($l=1, 2$) 的哈密顿量为

* 国家自然科学基金(批准号: 19504004)资助的课题.

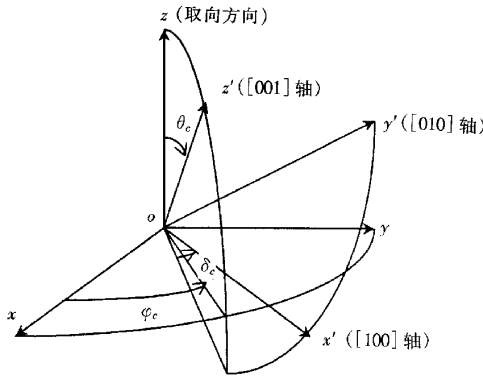


图 1 xyz 和 $x'y'z'$ 坐标系

$$H(l) = \lambda L \cdot S + \sum_{n,m} A_n^m(l) C_n^m + 2\mu_B H_{ex} \cdot S + \mu_B (L + 2S) \cdot H \quad (3)$$

$$A_n^m(1) = (-1)^{n/2} A_n^m(2),$$

$$(n = 2, 4, 6; |m| = 0, 2, 4, 6; |m| \leq n), \quad (4)$$

其中 λ 为自旋-轨道耦合系数, A_n^m 为晶场参数, H_{ex} 为稀土 (R)-Fe 交换场, H 为外磁场, 其他符号具有通常的意义. 对 Pr₂Fe₁₄B 和 Nd₂Fe₁₄B, λ 分别为 610 K 和 536 K^[8]. 对于给定的 H_{ex} 和 H , 在包括基态 J 和第一激发态 J' 构成的 $\sum_J (2J+1) \times \sum_{J'} (2J'+1)$ 维子空间中, 将 (3) 式对角化, 可求得 $R^{3+}(l)$ 离子的本征值 $E_n(l)$ 和相应的本征函数 $|n, l\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, \sum_J (2J+1)$). 化合物中晶粒 i 的 R₂Fe₁₄B 系统的自由能 E_i 为

$$E_i(H, \theta_{Fe}, \varphi_{Fe}, T) = -kT \sum_{l=1}^2 \ln Z(l) + K_{1Fe}(T) \cdot \sin^2 \theta_{Fe} + M_{Fe}(T) \cdot H \quad (5)$$

$$Z(l) = \sum_n \exp(-E_n(l)/kT), \quad (6)$$

其中 K_{1Fe} 和 $M_{Fe}(T)$ 分别为 Fe 晶格的磁各向异性常数和磁矩. 计算中 $H_{ex}(T)$ 是按正比于 $M_{Fe}(T)$ 随温度变化的. 而 $K_{1Fe}(T/T_C)$ 和 $M_{Fe}(T/T_C)$ (T_C 为居里温度) 的数值均取自 Y₂Fe₁₄B 的实验结果. 相对 $\theta_{Fe}, \varphi_{Fe}$ 求 (4) 式的最小值, 可确定晶粒 i 的 Fe 晶格磁化强度 M_{Fe} 的方位角 ($\theta_{Fe}, \varphi_{Fe}$). 晶粒 i 的 R(1) 离子的 R₂Fe₁₄B 系统的磁矩分别为

$$M_R(l) = \sum_n -\mu_B |l, m\rangle \langle 2S + L | n, l \rangle \cdot \exp(-E_n(l)/kT) Z(l), \quad (7)$$

$$M = \sum_{l=1}^2 M_R(l) + M_{Fe}, \quad (8)$$

从而确定晶粒 i 的磁化强度 M_s . 将化合物 N 个晶粒的 M_s 和方位角 (θ, φ) 代入 (1) 和 (2) 式, 即可计算出化合物沿取向方向和垂直于取向方向的磁化强度.

3 结果与讨论

表 1 列出 4.2 K 时计算使用的交换作用 $2\mu_B H_{ex}$ 与晶场参数 A_n^m , 所列参数是拟合化合物单晶

表 1 R₂Fe₁₄B ($R:Pr, Nd$) 在 4.2 K 的交换作用 $2\mu_B H_{ex}$ 与晶场参数 A_n^m (单位: K)

	$2\mu_B H_{ex}$	A_2^0/i	A_2^2/i	A_4^0	A_4^2/i	A_4^4	A_6^0	A_6^2/i	A_6^4	A_6^6/i
Pr ₂ Fe ₁₄ B	780	400	220	-150	0	0	-1050	0	0	-450
Nd ₂ Fe ₁₄ B	630	600	320	-260	0	0	-550	0	0	-400

磁化曲线得到的参数. 对于 Nd₂Fe₁₄B, 在 4.2 K 易磁化方向偏 [001] 轴的角度的计算值为 30.5°, 实验值为 30°—30.8°^[2,9], 自旋重取向温度的计算值为 135 K, 实验值为 135 K^[2,9]. 图 2 示出取向 Pr₂Fe₁₄B 多晶在 4.2 K 沿取向方向和垂直于取向方向的高场磁化曲线的计算和实验结果. 图 3 示出取向 Pr₂Fe₁₄B

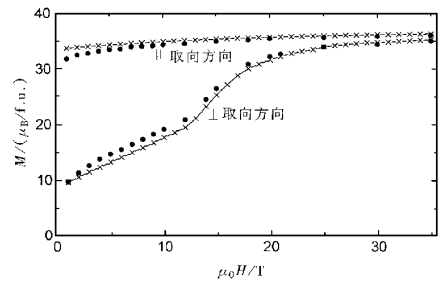


图 2 取向 Pr₂Fe₁₄B 多晶在 4.2 K 的磁化曲线

—○—为计算值, ●为实验值^[10]

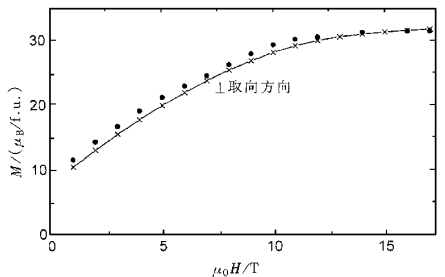


图 3 取向 Pr₂Fe₁₄B 多晶在 240 K 的磁化曲线

—○—为计算值, ●为实验值^[11]

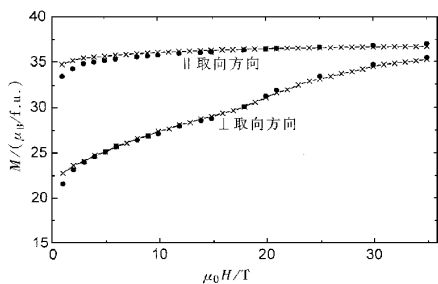


图 4 取向 $Nd_2Fe_{14}B$ 多晶在 4.2 K 的磁化曲线 图注同图 2

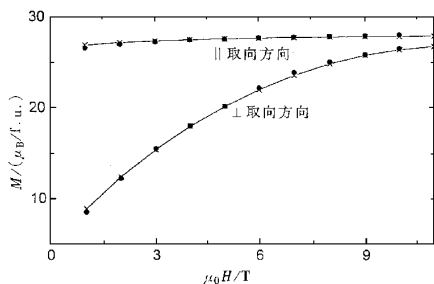


图 5 取向 $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ 多晶在 288 K 的磁化曲线 —×— 为计算值, ■ 为实验值^[12]

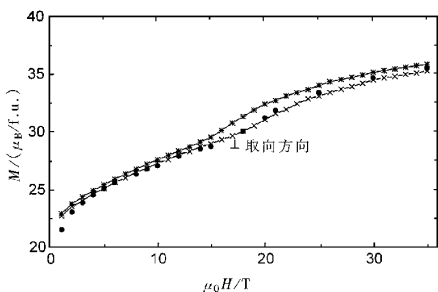


图 6 当晶场参数 A_2^0 变化 15% 时,取向 $Nd_2Fe_{14}B$ 多晶在 4.2 K 的磁化曲线 —×— 为用表 1 所列参数计算的值, * — 为用 A_2^0 变化 15% 的参数计算的值, ■ 为实验值^[10]

多晶在 240 K 沿垂直于取向方向的高场磁化曲线的计算和实验结果. 图 4 和图 5 分别示出取向 $Nd_2Fe_{14}B$ 多晶在 4.2 K 和取向 $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ 多晶在 288 K 的高场磁化曲线的计算和实验结果. 可以看出, 计算曲线与实验符合很好. 图 6 示出当晶场参数 A_2^0 变化 15% 时, 取向 $Nd_2Fe_{14}B$ 多晶在 4.2 K 沿垂直于取向方向的高场磁化曲线的计算和实验结果. 与用表 1 所列参数计算的结果相比, 用 A_2^0 变化 15% 的晶场参数计算的曲线与实验结果符合不好. 上述结果表明: 可以用本文所述方法计算 $R-Fe$ (Co) 化合物取向多晶样品的磁化曲线来得到化合物的主要晶场参数 A_n^m .

[1] M. Yamada, H. Kato, H. Yamamoto *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38** (1988) 620.
 [2] J. M. Cadogan, J. P. Gavigan, D. Givord *et al.*, *J. Phys.*, **F18** (1988) 779.
 [3] Yong Zhu, Tie-song Zhao, Han-min Jin *et al.*, *IEEE Trans. Magn.*, **MAG-25** (1989) 3443.
 [4] J. P. Gavigan, H. S. Li, J. M. D. Coey *et al.*, *J. Phys. Colloq.*, **49** (1988) C8-557.
 [5] R. Verhoef, J. J. M. Franse, A. A. Menovsky *et al.*, *J. Phys. Colloq.*, **49** (1988) C8-565.
 [6] Y. B. Kim, Han-min Jin, *J. Magn. Magn. Mater.*, **169** (1997) 114.
 [7] Y. B. Kim, Han-min Jin, *J. Magn. Magn. Mater.*, **173** (1997) 93.
 [8] S. Hufner, *Optical Spectra of Transparent Rare-Earth Compounds* (Academic, London, 1978) p. 34.
 [9] K. Tokuhara, Y. Ohtsu, F. Ono *et al.*, *Solid State Commun.*, **56** (1985) 333.
 [10] Ying-kai Huang, C. H. Wu, Y. C. Chuang *et al.*, *J. Less-Common Met.*, **132** (1987) 317.
 [11] Fu-ming Yang, Ru-wen Zhao, Xin-wen Li *et al.*, *Digests of 6th National Conference on Magnetism* (Wuhan, 1987), p. 67 (in Chinese) 杨伏明、赵汝文、李新文等, 第六届全国磁学会议论文集(武汉, 1987), 第 67 页.]
 [12] K. D. Durst, H. Kronmuller, *J. Magn. Magn. Mater.*, **59** (1986) 86.

CALCULATION OF MAGNETIZATION CURVES FOR MAGNETICALLY ALIGNED $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ AND $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ *

YAN YU JIN HAN-MIN

(*Department of Physics , Jilin University , Changchun 130012 , China*)

(Received 15 October 1999 ; revised manuscript received 1 December 1999)

ABSTRACT

On the basis of the single-ion model , a method of calculation on the magnetization curves for magnetically aligned rare-earth-Fe(Co) intermetallic compound is developed. High-field magnetization curves for magnetically aligned $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ and $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ were calculated by using the above method. In the calculations , the fitted exchange and crystalline field parameters from magnetization curves of the single crystals were used. The calculated curves agree well with the experiments.

Keywords : magnetization curves , crystalline-electric-field , $R_2\text{Fe}_{14}\text{B}$

PACC : 7550B , 7530G

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19504004).