

强磁场下 $\text{Er}_2\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的磁晶各向异性*

王 维 张锡娟 杨翠红 成海英

(扬州大学理学院物理系, 扬州大学复杂性科学中心, 扬州 225002)

(2002 年 4 月 25 日收到, 2002 年 6 月 25 日收到修改稿)

用量子理论定量计算了 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 在强磁场作用下, 温度为 4.2K, 外磁场沿着 [001] [100] [110] 和 [111] 四个方向的磁化强度. 可以看出, 磁化强度随着外磁场呈很强的各向异性, 而在低温弱磁场下, 磁化强度和外磁场呈线性关系.

关键词: 磁晶各向异性, 磁化强度

PACC: 7530G, 7560E, 7430C

1. 引 言

十多年来, 磁性稀土石榴石的磁光性质一直引起人们的广泛兴趣, 主要原因就是其具有广阔的应用前景, 在通讯及计算机技术中的应用尤其突出, 是应用广泛的功能材料. 人们对它已进行了大量的实验研究^[1,2]. 特别是近年来, 实验发现磁化强度 (M) 与 Faraday 旋转 (FR) 之间的关系呈复杂性变化, 更引起了人们的极大关注^[3]. Guillot 等^[4] 实验发现, 在温度范围为 4.2—300K, 直流磁场强达 $3 \times 10^8 \text{ A}^{-1}$ ($4\pi\text{m}$) 的过程中, 当外磁场沿着单晶 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的 [100] 和 [111] 方向时, FR 和 M 均有很强的各向异性. 而在低温下, 当磁化很弱时 (外磁场较小时) FR 与 M 呈线性关系. 为什么在强磁场下会出现各向异性, 对此磁光特性的理论分析是极少的. 本文根据量子理论以及 ErGaG 的微观结构, 不采用任何拟合参量, 计算了外磁场在 $0-3 \times 10^8 \text{ A}^{-1}$ ($4\pi\text{m}$) 沿 ErGaG 的不同方向磁化, 得到了与实验符合较好的理论结果, 为研究 ErGaG 的磁晶各向异性提供了可靠的理论数据.

2. 基本理论

在 ErGaG 晶体内, Er^{3+} 的 Hamiltonian 为^[5,6]

$$H = H_0 + H_c + H_{\text{ex}}, \quad (1)$$

式中 H_0 为自由 Er^{3+} 离子的 Hamiltonian, H_c 为晶场作用, H_{ex} 为外磁场的作用.

具体表达式分别表示为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (2)$$

$$H_c = \sum_i \sum_{kq} A_{kq} r_i^k Y_{kq}(\theta_i, \phi_i), \quad (3)$$

$$H_{\text{ex}} = \mu_B (L_z + 2S_z) H, \quad (4)$$

式中 A_{kq} 为晶场系数, $Y_{kq}(\theta, \phi)$ 为球谐函数, μ_B 为玻尔磁子, H 为外磁场. 由于稀土石榴石属立方空间群 $Ia\bar{3}d$, 其中三价 Er^{3+} 离子占据 C 晶位. 根据 D_2 对称性, 晶场可以简化为

$$H_c = \sum A_{20} r^2 Y_{20} + A_{40} r^4 Y_{40} + A_{60} r^6 Y_{60}. \quad (5)$$

求解下列久期方程:

$$\| \varphi_i | H_0 + H_c + H_{\text{ex}} | \varphi_j - E_g \delta_{ij} \| = 0 \quad (6)$$

得到经晶场作用和 Zeeman 劈裂的能级和波函数. 由下式计算各个晶位 Er^{3+} 的离子磁矩:

$$\bar{m} = -\mu_B \sum_g | (L_z + 2S_z) | g \rangle \rho_g, \quad (7)$$

式中 $|g\rangle$ 为由 (6) 式得到的基态波函数, ρ_g 为占据 $|g\rangle$ 态的概率, 可表示为

$$\rho_g = \frac{e^{-E_g/kT}}{\sum_g e^{-E_g/kT}}. \quad (8)$$

由以上的公式可以看出, 粒子处于基态的概率以及基态的能级分布与外磁场和温度有关, 因此外磁场和温度的变化直接影响了离子的基态磁矩^[6].

* 江苏省教育厅基金 (批准号: KJB140011) 和国家自然科学基金 (批准号: 60072032 和 79970121) 资助的课题.

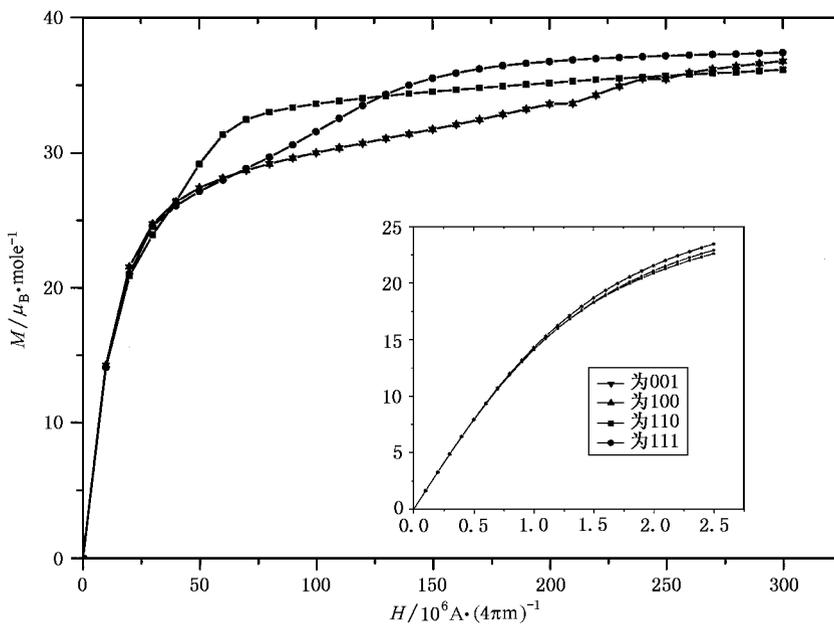


图1 $T = 4.2\text{K}$ 时磁矩 M 随外磁场 H 的变化关系(小图表明 $0 \sim 2.5 \times 10^7/\text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 时沿四个方向的磁化情况)

3. 结果与分析

我们知道, Er^{3+} 离子在石榴石中, 与其近邻氧离子构成八面体, 其空间取向有六种不同取向, 因而也就有六种不同的晶位. 考虑 Er^{3+} 离子的 $4f^{11}$ 组态中的 $^4I_{15/2}$ 谱项^[7-9], 经晶场劈裂后为 16 条二重简并能级, 其最低能级为 -24.36583cm^{-1} . 计算中晶场系数分别为 $A_{20} r^2 = 100\text{cm}^{-1}$, $A_{40} r^4 = -260\text{cm}^{-1}$, $A_{60} r^6 = 40\text{cm}^{-1}$. 在考虑外磁场对单晶 ErGaG 的作用

时, 对六种不同晶位均分别计算了外磁场沿着四个不同的晶轴方向 $[001]$ 、 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 对 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的作用. 分别得到了基态 Er^{3+} 离子的磁矩随外磁场变化的关系. 磁场的变化模拟实验结果, 范围从 $0 \sim 3 \times 10^8/\text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$, 温度取为 4.2K , 如图 1 所示.

由图 1 可以看出, $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的磁化随外磁场的增加有明显的各向异性. 特别是在磁场大于 $5 \times 10^7/\text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 的情况下, 各向异性更加突出. 磁场沿 $[001]$ 和 $[100]$ 方向时, 其结果是等价的. 外磁场约在

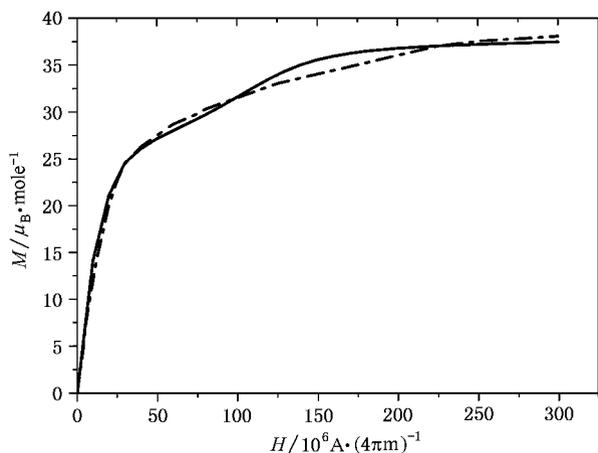


图2 外磁场沿 $[111]$ 方向, $T = 4.2\text{K}$ 时磁矩 M 随外磁场 H 的变化关系. 实线为理论值; 虚线为实验值

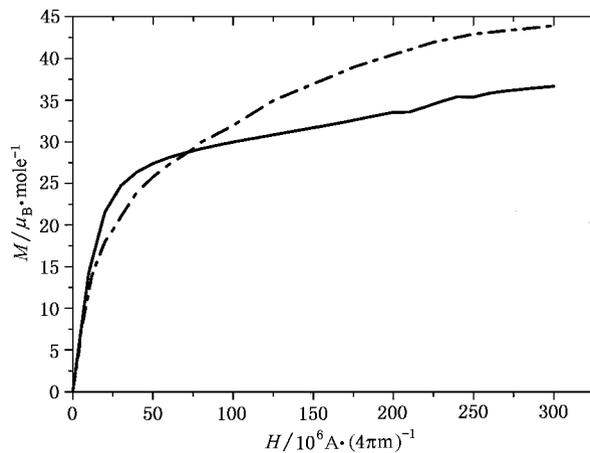


图3 外磁场沿 $[100]$ 方向, $T = 4.2\text{K}$ 时磁矩 M 随外磁场 H 的变化关系. 实线为理论值; 虚线为实验值

$1.3 \times 10^8 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 以后,沿[111]方向磁化,其磁矩最大.应该注意到,在磁场较小时,磁特性是服从线性关系的,而且无各向异性特征.

我们将外磁场沿[100]和[111]方向作用的理论值与文献[4]的实验值进行比较.由图2可以看出,[111]方向的磁化随外磁场的变化,理论值与实验值符合得相当好,图3为[100]方向的情况,在外磁场达到 $8 \times 10^7 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 以上时,理论值小于实验值,差异则比较明显.文献[10—12]中,以中子衍射方法测得每个稀土 Er^{3+} 离子的磁矩大约为 $7\mu_{\text{B}}$. 我们所计算得到的每个稀土离子的磁矩在外磁场为 $2 \times 10^8 - 3 \times 10^8 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 的范围内约为 $6.22\mu_{\text{B}}$.

文献[4]中特别提到外磁场在 $8 \times 10^7 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 时,沿[111]和[100]方向的磁化曲线存在交叉点.我们的理论计算表明,外磁场约在 $7 \times 10^7 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$ 时,该两方向的磁化曲线确实存在交叉点,并且[111]和[110]方向的磁化曲线也存在交叉点,磁场大概是 4×10^7 和 $1.25 \times 10^8 / \text{A} \cdot (4\pi\text{m})^{-1}$.

总之,我们采用量子理论的方法分析 ErGaG 的磁矩随外磁场的变化还是比较成功的,得到了与实验比较符合的数据.

特别感谢南京大学徐游教授和扬州大学顾长华教授所给予的指导和有益的讨论.

- [1] Zhou J *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48S** 217 [in Chinese] 周 健等 1999 物理学报 **48S** 217]
- [2] Feng Q Y *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 152 [in Chinese] 冯全源等 2000 物理学报 **49** 152]
- [3] Oppeneer J M, Sticht J, Maurer T and Kubler J 1992 *Z. Phys.* B **88** 309
- [4] Guillot M, Schmiedel T and Xu Y 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 6762
- [5] Zhang X, Xu Y and Guillot M 1999 *Eur. Phys. J.* B **9** 187
- [6] Yang J H and Xu Y 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 170 [in Chinese] 杨杰慧、徐 游 1997 物理学报 **46** 170]

- [7] Wybourne G B 1962 *J. Chem. Phys.* **36** 230
- [8] Laming R I, Poole S B and Tarbox E J 1988 *Opt. Lett.* **13** 1084
- [9] Maeda Y 1992 *J. Appl. Phys.* **72** 3835
- [10] Guillot M, Marchand A, Tcheou F, Feldman P and Le Gall H 1981 *Z. Phys.* **44** 41
- [11] Guillot M, Tcheou F, Marchand A and Feldman P 1980 *C. R. Acad. Sci. (Paris)* B **291** 227
- [12] Hock R, Fuess H, Vogt T and Bonnet M 1991 *Z. Phys.* B **82** 283

The magnetocrystalline anisotropy of $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ under high magnetic field^{*}

Wang Wei Zhang Xi-Juan Yang Cui-Hong Cheng Hai-Ying

(Department of Physics and Complexity Science Centre, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

(Received 25 April 2002; revised manuscript received 25 June 2002)

Abstract

Magnetization is calculated at 4.2 K under a high magnetic field using quantum theory when the magnetic field is applied parallel to [001] [100] [110] and [111] directions. A strong anisotropy of magnetization is observed. At low temperature, the magnetization is a linear function of the magnetic field applied when the field is weak.

Keywords: magnetocrystalline anisotropy, magnetization

PACC: 7530G, 7560E, 7430C

* Project supported by the Foundation of the Education Bureau of Jiangsu Province, China (Grant No. KJB140011) and by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60072032 and 79970121).