

化合物 SmCo_5 的电子结构、自旋和轨道磁矩 及其交换作用分析*

张昌文 李 华[†] 董建敏 王永娟 潘凤春

(山东大学物理与微电子学院, 济南 250100)

郭永权 李 卫

(钢铁研究总院功能材料研究所, 北京 100081)

(2004 年 4 月 21 日收到, 2004 年 10 月 18 日收到修改稿)

用自旋极化的 MS-X α 方法研究了稀土-过渡族化合物 SmCo_5 的电子态密度、自旋能级劈裂及原子磁矩. 研究结果显示, 由于化合物中 Sm-Co 间的轨道杂化效应, 使 Sm 原子原来的 5d⁰ 空轨道上占据了少量 5d 电子. 由于 C α (3d)-Sm(5d) 电子间的直接交换作用, 导致了 Sm-Co 间的磁性交换耦合, 这是化合物中形成 Sm-Co 铁磁性长程序的一个重要原因. 在 SmCo_5 化合物中存在 6 个能级呈现负交换耦合, 导致了 SmCo_5 化合物的居里温度(与金属钴相比)明显下降. 还研究了化合物中 2c 和 3g 晶位 Co 的自旋磁矩和轨道磁矩, 发现 C α (2c) 晶位的自旋磁矩、轨道磁矩及冻结部分均略大于 C α (3g) 晶位, 所以 2c 晶位的 L-S 耦合强度应略大于 3g 晶位. 因此 2c 晶位对 SmCo_5 磁晶各向异性的影响也应大于 3g 晶位. 但 C α (2c) 未被冻结的轨道磁矩却略小于 C α (3g), 所以两种晶位对磁晶各向异性的贡献大小之差别不应太大. 考虑到 4f 电子的局域性和化合物中轨道杂化效应所导致的 Sm(5d⁰) 空轨道上占据了少量 5d 电子, 可以得到 Sm 原子磁矩为 $1.29\mu_B$, 与顺磁盐中 Sm^{3+} 磁矩实验值(1.32—1.63 μ_B)及金属中 Sm 原子磁矩实验值(1.74 μ_B)基本符合.

关键词: 电子结构, 自旋极化, 原子磁矩, 交换耦合

PACC: 7500, 7115

1. 引言

$\text{RCO}_{5-x}\text{T}_x$ ($R = \text{Y, La, Sm, Gd}; T = \text{Ni, Cu, Fe}$ 等) 型金属间化合物作为具有优良磁性能的稀土永磁材料, 在实验^[1-3]和理论^[4-9]上都得到了广泛的研究. 以 SmCo_5 为基的永磁材料是技术上应用最广泛的磁性材料之一, 目前它在磁性材料应用领域占有非常重要的地位. 尽管人们已对它的宏观物理性质及微观电子结构作了大量研究^[10-12], 但仍有许多物理机制至今还没有得到令人满意的解释. 实验已证实^[9], SmCo_5 化合物具有较高的居里温度($T_C = 1010^\circ\text{C}$)和较强的磁晶各向异性等物理性质. 在化合物 SmCo_5 中存在 Co-Co, Sm-Co 和 Sm-Sm 交换耦合, 其中 Sm(4f)-Sm(4f) 电子之间的交换作用属于弱耦合, 一般可忽略不记. 由于 Sm(4f) 电子是局域的内层电子,

Sm(4f)-C α (3d) 之间的交换作用也应属于弱耦合. 但超精细场实验已经证实, Sm-Co 间的交换耦合强度与 C α (3d)-C α (3d) 间的交换耦合强度具有大致相同的数量级. 文献^[10]认为, 较强的 Sm-Co 交换耦合作用可能是由传导电子的自旋极化效应所致. 但是, 这种类似于 RKKY 型的间接交换作用能否产生 Sm-Co 长程磁有序耦合, 至今仍是一个问题^[13]. 此外, 化合物 SmCo_5 的主要成分是 Co, 但它的居里温度为何比金属钴有明显的降低? 还有, 金属中 Sm 原子磁矩的实验值是 $1.74\mu_B$ ^[13], 顺磁盐中 Sm^{3+} 磁矩一般在 $1.32-1.63\mu_B$ 范围^[14], 而 Hund 法则的磁矩理论值一般是 $0.85\mu_B$ 左右^[13, 14]. 已知 Sm 原子的 4f 电子处在内壳层, 有很强的局域性. 根据铁磁理论, 在化合物 SmCo_5 中, Sm 原子磁矩的大小应与上述实验值^[14, 15]大致相当. 而文献^[16-18]对 SmCo_5 等化合物磁性的理论研究认为, Sm 原子磁矩在 $0.38-$

* 国家高技术研究发展计划(批准号: 2002AA324050)和山东省自然科学基金(批准号: Y2002D9)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: huali@sdu.edu.cn

$0.40\mu_B$ 之间.但是上述 Sm 原子磁矩的理论值均明显小于实验值.为了解释这种理论与实验的不一致性,有人认为可能是 Sm 离子处于激发态的原因,事实是否如此?因此,在 SmCo_5 化合物中形成 Sm-Co 长程磁有序的耦合机制,一直是人们研究的一个理论课题.为了从理论上揭示这些问题的物理本质,我们根据能带理论,用自旋极化的 MS-X α 方法对 SmCo_5 化合物的电子结构进行了研究.本文所得的一些结果,对于深入理解 $\text{SmCo}_{5-x}\text{T}_x$ 型系列化合物的许多物理性质的微观机理提供了有益的帮助.

2. 研究模型

化合物 SmCo_5 具有空间群为 $P6/mmm$ 的 CaCu_5 型结构^[8].分析它的晶格结构,不难看出 SmCo_{18} 原子簇是化合物 SmCo_5 的一个基本构成单元,这是一个具有 D_{6h} 点群对称性的正多面柱体.在 SmCo_{18} 原子簇中,Sm 原子位于坐标为 $(0, 0, 0)$ 的 $1a$ 晶位,处于原子簇的对称中心地位.与坐标 $\pm\left(\frac{a}{3}, \frac{2a}{3}, 0\right)$ 等价的 6 个 $2c$ 晶位 $\text{Co}(2c)$ 原子构成等边六角形,它们与 Sm 原子共同构成 A 层.与坐标 $\pm\left(\frac{a}{2}, 0, \frac{c}{2}\right)$, $\pm\left(0, \frac{a}{2}, \frac{c}{2}\right)$ 和 $\pm\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{c}{2}\right)$ 等价的 12 个 $3g$ 晶位 $\text{Co}(3g)$ 原子分别构成两个等边六角形 B_I 和 B_{II} 层. A 层与 B 层之间沿 $[0001]$ 轴的距离为 $\frac{c}{2}$, A 层六角形与 B 层六角形平面均与 $[0001]$ 轴垂直,但两类六角形平面沿 $[0001]$ 轴相差 30° .化合物 SmCo_5 的晶格常数取 $a = 0.5002 \text{ nm}$, $c = 0.3964 \text{ nm}$ ^[19].由于 Sm 原子是 La 系的第六个元素,所以在计算中我们把 $\text{Sm}(4f^6)$ 轨道作为价轨道处理,其价电子取为 $4f^6 5s^2 5p^6 5d^0 6s^2$. Co 原子的价电子取为 $3d^7 4s^2$,其余电子均作为芯电子处理.对于原子半径,考虑到 SmCo_5 是金属结构,所以在计算中没有把 Sm 和 Co 简单地视为二价或三价离子处理,而是取其离子半径和原子半径的平均值,我们取 Sm 离子的半径为 0.1385 nm , Co 离子的半径为 0.0943 nm .计算中采用糕模势.关于最大分波数,对于 Sm 和 Co, $L_{\max} = 3$; 外球的 $L_{\max} = 4$. Sm 与 Co 的交换参数 α 采用 Schwarz^[20]给出的值.

3. 结果及讨论

本文的研究结果表明,在化合物 SmCo_5 中, Sm 的自旋磁矩是 $-5.19\mu_B$ (与 Co 原子磁矩反平行)其中含有 5d 自旋磁矩 $-1.71\mu_B$ 和 6s 自旋磁矩 $-0.15\mu_B$. 6s 是传导电子,这一微小磁矩是自旋极化效应所致. 5d 自旋磁矩是由于 Sm-Co 轨道杂化效应导致原来的 $\text{Sm}(5d^0)$ 空轨道上占据了少量 5d 电子. 5d 轨道扩展性很强,处于外层,其轨道磁矩基本被冻结.研究结果也显示, 4f 电子具有很强的局域性,但仍有少量 4f 电子上升到费米面附近,表现出一定的扩展特征.由于 Hubbard 模型的实质只是考虑了原子内的电子关联,根据这一理论并考虑到 4f 电子的上述特征,可得 $\text{Sm}(4f)$ 的轨道磁矩是 $6.48\mu_B$, 所以 Sm 原子磁矩为 $1.29\mu_B$, 与上述实验值 ($1.32-1.74\mu_B$) 基本相符.由 Hund 法则计算的理论值 ($0.85\mu_B$)^[13,14] 以及文献 [16—18] 的计算值 ($0.38-0.40\mu_B$) 比实际值偏小,因为 $\text{Sm}(4f^6)$ 被认为是局域性很强的内层电子,且 4f 自旋磁矩与轨道磁矩反方向,而没有考虑到化合物中轨道杂化效应所导致的 $\text{Sm}(4f^6)$ 和 $\text{Sm}(5d^0)$ 轨道态的变化.本文的理论结果给出了这些变化及其影响(见表 1),较好地解释了这一现象.本文还得到 $\text{Co}(2c)$ 的自旋磁矩是 $1.24\mu_B$, $\text{Co}(3g)$ 的自旋磁矩是 $1.20\mu_B$.显然, $2c$ 和 $3g$ 两个晶位的磁矩均略小于化合物 SmCo_5 中平均 Co 原子磁矩的实验值 $1.39\mu_B$ ^[15],这是因为还有轨道磁矩的贡献所致. SmCo_5 有很强的单轴各向异性,根据单粒子模型,这种磁晶各向异性是由于 L-S 耦合与晶场共同作用的结果.因此, Co 原子的 3d 轨道不是被晶场全部“冻结”.根据铁磁理论,可以得到 $2c$ 晶位 Co 原子的轨道磁矩约为 $0.4\mu_B$.所以 $2c$ 晶位 Co 原子磁矩理论值应为 $1.64\mu_B$.与实验值 $1.39\mu_B$ 相比,差值 $0.25\mu_B$ 就是被冻结的轨道磁矩.根据同样的道理,得到 $3g$ 晶位 Co 原子的轨道磁矩约为 $0.29\mu_B$, $3g$ 晶位 Co 原子磁矩的理论值为 $1.49\mu_B$, 所以 $3g$ 晶位被冻结的轨道磁矩约为 $0.10\mu_B$.可见 $2c$ 晶位对轨道磁矩的实际贡献约为 $0.15\mu_B$, $3g$ 晶位对轨道磁矩的实际贡献约为 $0.19\mu_B$, 与文献 [14] 实验测量得到的 Co 原子轨道磁矩值 $0.147\mu_B$ 基本一致.研究结果还表明,在化合物

SmCo₅ 中, Co(3d) 电子具有很强的扩展性, 平均每个 Co 原子提供了 1.08 μ_B 的巡游磁矩. 表 1 中列出了原子簇 SmCo₁₈ 的原子价态、价电子数及原子磁矩的理论计算结果, 为了便于比较, 表中同时列出了相应

的实验测量值. 显然, 化合物 SmCo₅ 总磁矩的理论计算值约为 8.24 μ_B , 与其实验值(8.27—8.58 μ_B 及 8.69 μ_B) 符合得很好. 这一结果也说明我们的理论结果具有较好的合理性.

表 1 SmCo₅ 的原子价态、价电子数及原子磁矩的理论值和实验值

原子	自旋	s	p	d	f	价态	理论值			实验值 ^[13-15]
							自旋	轨道	总磁矩	
Sm	↑	0.675	2.937	0.384	1.395	-0.096	-5.188	6.481	1.293	1.32 - 1.63
	↓	0.829	2.956	2.094	4.764					1.74
Co(2c)	↑	1.103	0.292	3.391	0.004	+3.796	1.241	0.152	1.393	1.39
	↓	1.109	0.151	2.287	0.002					
Co(3g)	↑	0.986	0.078	4.194	0.003	+2.811	1.195	0.191	1.386	1.39
	↓	0.907	0.034	3.122	0.001					
总磁矩									8.237	8.27—8.69

注: 理论值包括巡游磁矩, 磁矩单位为 μ_B .

化合物 YCo₅ 和 SmCo₅ 具有相同的空间晶格结构. 尽管 Y 离子没有提供磁性来源的磁性电子, 但有与 La 系元素(5d⁰6s² 或 5d¹6s²) 类似的 4d¹5s² 型电子结构. 为便于说明问题, 表 2 列出了近年来一些其他计算方法对 YCo₅ 和 SmCo₅ 的计算结果及 SmCo₅ 的轨道磁矩实验测量值. 可以发现, YCo₅ 的 Co(2c) 和 Co(3g) 的轨道磁矩大约为 0.11—0.13 μ_B , 与我们的理论结果非常接近. 由于 SmCo₅ 有很强单轴各向异性, 一般认为这种磁晶各向异性主要是由于 L-S 耦合与晶场的共同作用产生. 文献 [2] 中的中子极化实验研究结果认为, SmCo₅ 的磁晶各向异性主要是由 2c 晶位上 Co 的轨道磁矩提供的, 而中子非弹

性自旋反转散射实验^[21]却表明, Co 的两种晶位对各向异性的贡献大致相同, 其轨道磁矩也大致相等. 目前实验上尚无法直接测定出 SmCo₅ 中两种不同 Co 晶位的轨道磁矩, 也未见对 SmCo₅ 的 Co(2c) 和 Co(3g) 晶位轨道磁矩的理论研究结果. 我们的计算结果表明, Co(2c) 自旋磁矩、轨道磁矩和冻结部分均略大于 Co(3g). 显然, 2c 晶位的 L-S 耦合强度应略大于 3g 晶位, 所以 2c 晶位对 SmCo₅ 磁晶各向异性的影响也应大于 3g 晶位; 但 Co(2c) 未被冻结的轨道磁矩却略小于 Co(3g). 可见, 化合物 SmCo₅ 中的两种晶位对磁晶各向异性的贡献大小之差别不应太大.

表 2 不同方法计算的 YCo₅ 和 SmCo₅ 的自旋磁矩和轨道磁矩(单位: μ_B)

原子	FLAPW ^[22]			LCAO ^[22]			FLMTO ^[23] 总磁矩	LSDA ^[23] 自旋
	自旋	轨道	总磁矩	自旋	轨道	总磁矩		
Sm							-0.37	-0.35
Y	-0.16	0.01	-0.15	-0.18	-0.03	-0.21		
Co(2c)	1.58	0.11	1.69	1.46	0.13	1.59	1.58	1.47
Co(3g)	1.54	0.13	1.67	1.52	0.11	1.63	1.55	1.50
总磁矩	7.06	0.62	7.68	7.30	0.57	7.87	7.74	7.09

图 1 是原子簇 SmCo₁₈ 的电子态密度(DOS) 曲线. 它的一个明显特点是, 在费米面($E_F = -1.65$ eV) 处, DOS 的主要成分由 d 电子提供, 其曲线分布比较平缓, 宽约 4.5 eV, 表明 3d 电子的扩展性很强.

由于轨道杂化效应, s 和 p 电子对费米面附近的 DOS 也有少量贡献. f 电子的主要成分被局域在费米面以下较深的能级上, 带宽约为 1.2 eV, 表现出较强的局域性. 在 -12 eV 附近出现一个宽约 1 eV 的能隙,

将总 DOS 分为属性不同的两部分,在能隙以上,特别在 E_F 附近,轨道杂化效应强烈;在能隙以下,DOS 的主峰表现了 f 电子的局域特点;而在能隙以上的少量 f 电子则表现出一定的扩展特征.图 2 是化合物 SmCo_5 中 $\text{Co}(3g)$ 晶位的 DOS 曲线.曲线被位于 -5.8 和 -12 eV 处的两个能隙分为三部分,靠近费米面的 DOS 主要是 3d 电子及少量 s 电子的贡献.图 3 是 $\text{Co}(2c)$ 晶位的 DOS 曲线.在 -12 eV 附近有一个能隙,将曲线分成两部分,在费米面处的 DOS 主要来自 p 电子、d 电子及 s 电子的贡献.比较 $2c$ 和 $3g$ 两种晶位在费米面处的 DOS 曲线可以发现, $3g$ 晶位的 d 电子对 DOS 的贡献大于 $2c$ 晶位.图 4 是 Sm 原子的 DOS 曲线.4f 电子的主要成分深居在费米面以下的 -22.5 — -26 eV 范围内,在 -20.5 — -22.5 和 -11.5 — -14 eV 的范围内存在两个明显的较大能隙,在费米面附近的 DOS 成分主要是轨道杂化效应产生的 5d 电子和少量的 s、p 和 f 电子.不难发现,5d 电子具有很强的扩展性,而 4f 的主要成分具有很强的局域性.

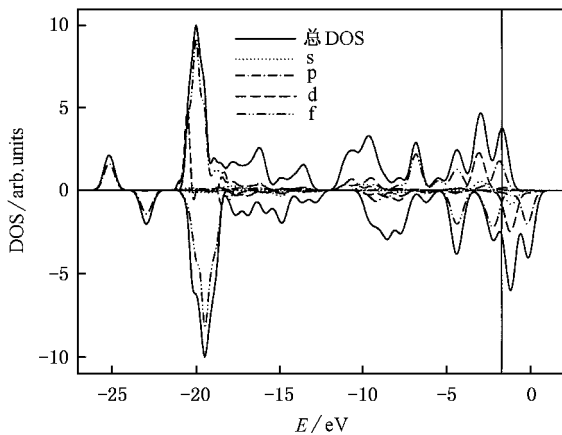


图 1 原子簇 SmCo_{18} 的 DOS 曲线

图 5 是 Co 原子 3d 和 Sm 原子 5d 轨道 DOS 曲线.由图 5 可见,在费米面附近,Co(3d)和 Sm(5d)电子有着强烈的耦合,这就是 5d-3d 交换耦合.化合物 SmCo_5 的居里温度等磁有序性质主要由 Co-Co 和 Sm-Co 间的交换作用决定.前者是 3d-3d 直接交换耦合,属于强耦合;后者一般认为是 4f-3d 交换作用,由于 4f 电子是内层局域电子,所以这类交换作用似乎应属于弱耦合.但超精细场实验已经证实,Sm-Co 间的交换耦合强度与 Co(3d)-Co(3d)间的交换耦合强度具有大致相同的数量级.为了解释这种现象,文献 [10] 认为,这可能是由于被极化的传导电子的作用

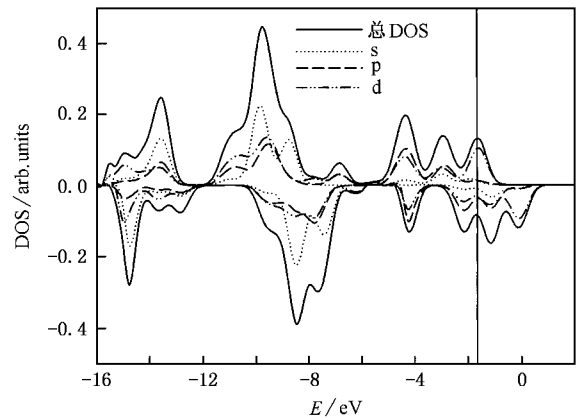


图 2 $\text{Co}(3g)$ 的 DOS 曲线

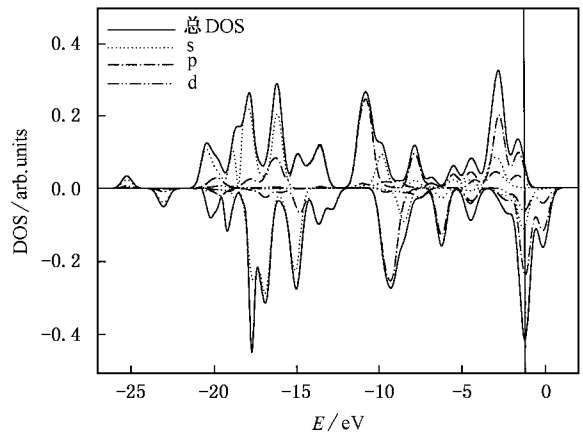


图 3 $\text{Co}(2c)$ 的 DOS 曲线

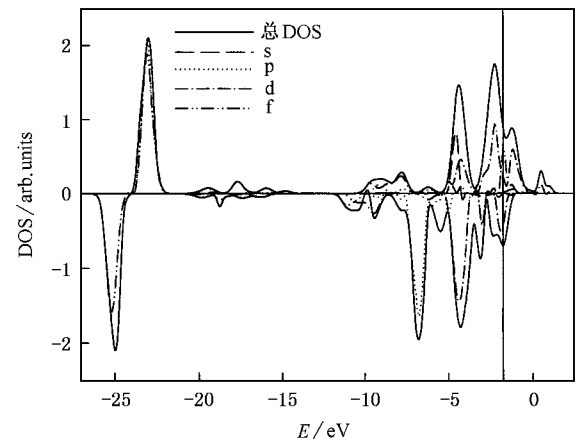


图 4 Sm 的 DOS 曲线

导致了 4f-3d 间的强交换耦合.本文的研究结果显示,在 Sm 和 Co 格点周围确实存在少量 s 电子自旋磁矩.这在一定程度上证实了这种猜测.但是,由于

极化的传导电子机制对 s 电子的数量非常敏感,所以这种类似于 RKKY 型的间接交换作用模型对此问题的实用性是有问题的^[13]. 本文的研究结果证实,由于化合物中 Sm-Co 间的轨道杂化效应,导致原来的 $\text{Sm}(5d^0)$ 空轨道上占据了 2.48 个 5d 电子(表 1). 在 SmCo_5 中, $\text{Sm}(5d)$ 电子与 $\text{Co}(3d)$ 电子一样处于外层,扩展性很强,它们之间产生了类似于 3d-3d 直接交换作用的 5d-3d 强交换耦合. 交换耦合使 $\text{Sm}(5d)$ 能带与 $\text{Co}(3d)$ 能带发生劈裂,劈裂大小分别约为 0.7 和 1.5 eV(3d 带是 2c 和 3g 晶位 d 电子的平均贡献). 我们认为,这种 5d-3d 交换耦合是化合物 SmCo_5 中产生 Sm-Co 长程磁有序的一个重要因素. 这一因素对 SmCo_5 磁有序的贡献要大于传导电子自旋极化效应的贡献. 分析图 5 的 DOS 曲线,不难发现 5d-3d 交换作用的结果导致 3d 与 5d 的净自旋方向反平行(在图 5 中,3d 多数自旋方向为正,5d 多数自旋方向为负). 在 2.48 个 5d 电子中,有 1.71 个负方向的净自旋. 根据海森伯交换作用理论,可知 5d-3d 交换作用的本质应属于反铁磁交换耦合. 但是,5d 与 4f 净自旋磁矩方向相同,而 4f 轨道磁矩与其净自旋磁矩方向相反. 比较 $\text{Sm}(4f)$ 的轨道磁矩 ($6.48\mu_B$) 与 Sm 原子自旋磁矩 ($-5.19\mu_B$),得到 Sm 原子磁矩为 $1.29\mu_B$,与 Co 原子磁矩同方向. 根据一般的铁磁唯象理论,由于化合物 SmCo_5 中的 Co 原子磁矩与 Sm 原子磁矩同方向,因此也就认同它是铁磁性物质. 为了解释轻稀土-过渡族金属间化合物的铁磁性,早在 1972 年, Campbell 就曾提出过类似的关于 5d-3d 反铁磁交换耦合模型的假设^[13]. 这一假设正好支持了我们的理论结果.

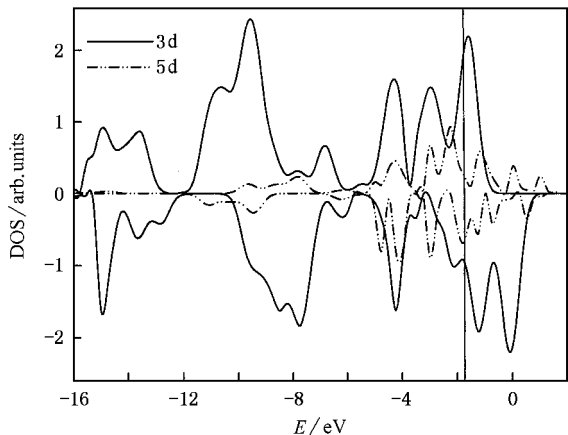


图 5 Co(3d) 和 Sm(5d) DOS 曲线

图 6 画出了原子簇 SmCo_{18} 自旋能级交换劈裂的计算结果. 关于 5d-3d 之间的反铁磁交换耦合的本质,也可由图 6 所示的自旋能级劈裂结果得到证实. 由图 6 可以发现,在 6 个能级上出现了负交换劈裂,即 $\Delta E = E_i(\downarrow) - E_i(\uparrow) < 0$, 它们分别是 ${}^7A_{1g}$, ${}^7E_{2u}$, ${}^7E_{1u}$, ${}^8E_{1g}$, ${}^{11}E_{2g}$ 和 ${}^{12}E_{2g}$ 能级. 计算结果表明,在 ${}^7A_{1g}$, ${}^8E_{1g}$, ${}^{11}E_{2g}$ 和 ${}^{12}E_{2g}$ 能级上的负交换耦合主要是 3d 和 5d 电子的贡献. ${}^7E_{1u}$ 能级是由于 Co(3d) 和 Sm(4f) 电子对传导电子的极化效应所导致的负交换耦合,这进一步证实了关于存在传导电子极化效应的猜测. ${}^7E_{2u}$ 能级主要是 Co(2c) 和 Co(3g) 两个晶位 3d 电子之间交换耦合的贡献,它的作用不仅减小了 Co-Co 之间交换劈裂的平均值,使 Co-Co 交换耦合强度减弱,而且导致了 Co 原子磁矩减小. 化合物 SmCo_5 中的 Co 原子磁矩 ($1.39\mu_B$) 比金属钴中的原子磁矩 ($1.75\mu_B$)^[21] 要小, SmCo_5 的居里温度也比金属钴 ($T_C = 1400^\circ\text{C}$) 明显降低. 显然,在 SmCo_5 中的几个分子轨道上存在的这些负交换耦合就是导致化合物居里温度降低和 Co 原子磁矩减小的重要原因.

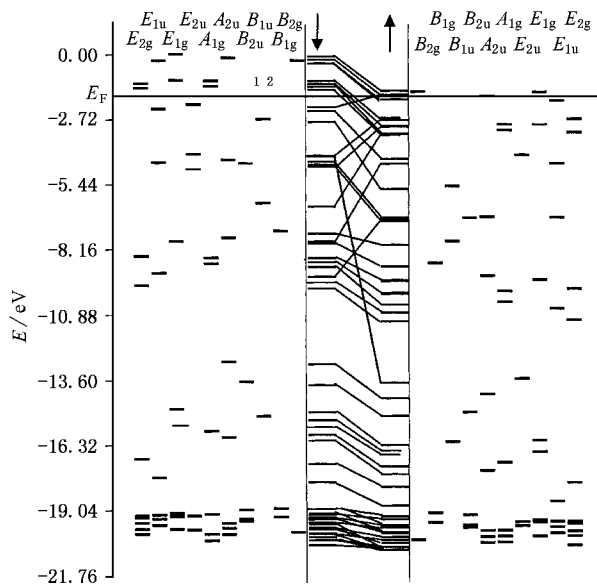


图 6 原子簇 SmCo_{18} 的自旋能级劈裂(↑, ↓ 分别表示电子自旋的两种取向)

4. 结 论

根据上述分析,可以得到以下结论:

- 1) Sm-Co 之间的轨道杂化效应使原来 $\text{Sm}(5d^0)$ 空轨道上占据了少量 5d 电子,导致 Co(3d)-Sm(5d)

间的直接交换耦合,其本质属于反铁磁(负)交换耦合,这是化合物 SmCo_5 中产生 Sm-Co 长程磁有序的一个重要原因.因为 $\text{Sm}(4f)$ 的轨道磁矩大于其原子自旋磁矩,所以 SmCo_5 中 Co 和 Sm 原子磁矩平行取向,根据一般的铁磁唯象理论,仍将其称为铁磁性物质.5d-3d 交换耦合是形成 SmCo_5 中 Sm-Co 间长程磁有序的一个重要因素,它与 $\text{Cd}(3d)$ - $\text{Cd}(3d)$ 直接交换耦合一样,属于强耦合.

2) 化合物 SmCo_5 中的 Co 原子磁矩($1.39\mu_B$)比金属钴中的原子磁矩($1.75\mu_B$)要小, SmCo_5 的居里温度也比金属钴明显降低.在 SmCo_5 中存在的 6 个负交换耦合能级就是导致化合物居里温度降低和 Co 原子磁矩减小的主要原因.

3) $\text{Cd}(2c)$ 晶位的自旋磁矩、轨道磁矩和冻结部

分均略大于 $\text{Cd}(3g)$ 晶位,所以 $2c$ 晶位的 L - S 耦合强度应略大于 $3g$ 晶位, $2c$ 晶位对 SmCo_5 磁晶各向异性的影响也应大于 $3g$ 晶位.但 $\text{Cd}(2c)$ 未被冻结的轨道磁矩却略小于 $\text{Cd}(3g)$,因此两种晶位对磁晶各向异性的贡献大小之差别不应太大.

4) 根据铁磁理论,考虑到深层 $4f$ 电子的局域性和费米面附近的少量 $4f$ 电子的扩展特征,以及化合物中轨道杂化效应所导致的 $\text{Sm}(5d^0)$ 空轨道上占据了少量 $5d$ 电子,可以得到 Sm 原子磁矩为 $1.29\mu_B$,与实验值(1.32 — $1.74\mu_B$)基本符合.有些作者得到的理论值比实际值偏小,这是因为一般认为 $\text{Sm}(4f^6)$ 是局域性很强的内层电子,且 $4f$ 自旋磁矩与轨道磁矩反方向,而没有考虑到化合物中轨道杂化效应所导致的 $\text{Sm}(4f^6)$ 和 $\text{Sm}(5d^0)$ 轨道态的变化.

- [1] Tellez-Blanco J C , Sato T R , Grossinger R *et al* 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 5157
- [2] Deportes J , Givord D , Schweizer J *et al* 1976 *IEEE Trans. Magn.* **12** 1000
- [3] Yan A , Bollero A , Gutfleisch O *et al* 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 2192
- [4] Larson P , Mazin I I 2004 *J. Magn. Magn. Mater.* **269** 176
- [5] Han X F , Yang F M , Zeng Z *et al* 1997 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Ed.) **6** 697
- [6] Lectard E , Allibert C H , Ballou R 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 6277
- [7] Crisan V , Popescu V , Vernes A *et al* 1995 *J. All. Compd.* **223** 147
- [8] Larson P , Mazin I I , Papaconstantopoulos D A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 214405
- [9] Han X F , Wang Q Y , Wang J *et al* 1998 *Chin. Phys.* **7** 38
- [10] Richter M 1998 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **31** 1017
- [11] Al-Omari I A , Skomski R , Thomas R A *et al* 2001 *IEEE Trans. Magn.* **37** 2534
- [12] Larson P , Mazin I I 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 6888
- [13] O'Handley R C 2002 *Modern Magnetic Materials Principle and Applications* (Beijing : Chemical Industry Press) p480 (in Chinese)
- [奥汉德利 R C 2002 现代磁性材料原理和应用(中译本)(北京:化学工业出版社)第 480 页]
- [14] Dai D S , Qian K M 1998 *Ferromagnetism* (Beijing : Science Press) p53 (in Chinese) [戴道生、钱昆明 1998 铁磁学(北京:科学出版社)第 53 页]
- [15] Zhou S Z 1990 *Rare-Earth Permanent Material and Their Application* (Beijing : Metallurgical Industry Press) p113 (in Chinese) [周寿增 1990 稀土永磁材料及其应用(北京:冶金工业出版社)第 113 页]
- [16] Malik S K , Arlinghaus F J , Wallace W E 1977 *Phys. Rev. B* **16** 1242
- [17] Zhao T S , Jin H M , Guo G H *et al* 1991 *Phys. Rev. B* **43** 8593
- [18] Givord D , Laforest J , Schweizer J *et al* 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 2008
- [19] Richter M , Oppeneer P M , Eschrig H *et al* 1992 *Phys. Rev. B* **46** 13919
- [20] Schwarz K 1972 *Phys. Rev. B* **5** 2466
- [21] Daslderop G H O , Kelly P J , Schuurmaps M F H 1996 *Phys. Rev. B* **53** 14415
- [22] Larson P , Mazin I I 2003 *J. Magn. Magn. Mater.* **264** 7
- [23] Hummler K , Fahnle M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 3272

Studies on the electronic structures , exchange coupling and magnetic moments of spin and orbital in the compound SmCo_5 *

Zhang Chang-Wen Li Hua Dong Jian-Min Wang Yong-Juan Pan Feng-Chun

(School of Physics and Microelectronics , Shandong University , Jinan 250100 , China)

Guo Yong-Quan Li Wei

(Institute of Functional Materials , Central Iron and Steel Research Institute , Beijing 100081 , China)

(Received 21 April 2004 ; revised manuscript received 18 October 2004)

Abstract

The electronic density of states , spin-splittings and atomic magnetic moment of RE-TM compound SmCo_5 have been studied by spin-polarized MS-X α method. The results show that a few of electrons are transferred to $\text{Sm}(5d^0)$ orbital because of orbital hybridization between Sm and Co atoms in the compound. The exchange interactions between 3d and 5d electrons lead to the magnetic coupling between Sm and Co , and therefore , result in the long-range ferromagnetic order inside the compound SmCo_5 . There are some negative exchange couplings occurring at six levels , which make the Curie temperature of SmCo_5 decrease distinctly , compared with pure Co. The spin moment and orbital moment of 2c and 3g sites have been also studied in this paper. We found that the spin moment , orbital moment and its quenched part of Co(2c) are greater than that of Co(3g). Therefore , the strength of *L-S* coupling of the former is a little greater than that of the latter , which implies the contribution to magneto-anisotropy of 2c site is greater than that of 3g site. But the unquenched orbital moment in 2c site is slightly smaller than that in 3g site. So , the difference of contribution to the anisotropy between the two Co-sites is not very distinct. Considering the localization of 4f electrons and the few 5d electrons , the magnetic moment of Sm atom will be $1.29\mu_B$ in SmCo_5 , which is in agreement with the experiments of Sm^{3+} ion-moment ($1.32\text{--}1.63\mu_B$) and the Sm atom-moment ($1.74\mu_B$) in metal.

Keywords : electronic structure , spin polarization , atomic magnetic moment , exchange coupling

PACC : 7500 , 7115

* Project supported by the National High Technology Development Program of China (Grant No. 2002AA324050) and the Natural Science Foundation of Shandong Province , China (Grant No. Y2002D9) .