第39卷 第6期 物 理 学 报 Vol. 39, No. 6
1990 年 6 月 ACTA PHYSICA SINICA June, 1990

$Ho_2Fe_{14}B$ 化合物的高场磁化过程*

赵铁松 金汉民
吉林大学物理系，长春，130023

1989 年 8 月 26 日收到

基于单离子模型，详细分析了 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物在 $T = 0K$ 沿[100]，[110]和[001]轴磁化时，Ho 和 Fe 次晶格的磁化过程．预测了该化合物在 $T = 0K$ 高达 2000 kOe 的磁场中沿主晶轴的磁化曲线．

PACC: 7530G; 7560E; 7550G; 7510D

一、引 言

近年来，有不少文献报道了各种$R_2Fe_{14}B$(R为稀土)化合物沿[100]，[110]和[001]轴的高场磁化曲线的测量结果[1-13]．轻稀土的 $R_2Fe_{14}B$ 化合物在低温往往呈现比较复杂的磁化曲线：$Pr_2Fe_{14}B$ 化合物沿[100]和[110]轴磁化时都出现一级磁化过程[13]．$Nd_2Fe_{14}B$沿[100]轴磁化时出现一级磁化过程[4-10]；$Sm_2Fe_{14}B$ 沿[001]轴磁化时出现异常变化[12]．对于重稀土的 $R_2Fe_{14}B$ 化合物，则还没有观察到上述复杂的磁化过程[1-5]．可以设想，对于重稀土化合物，这种过程可能出现在更高的磁场区．

在 $R_2Fe_{14}B$ 化合物的磁化过程中，R 和 Fe 次晶格的磁化过程则研究得还不多[14,15]．我们曾经基于单离子模型，通过拟合重稀土的 $R_2Fe_{14}B$ 化合物的自发磁化随温度的变化，自旋重取向温度，以及 4.2K 和较高温度的磁化曲线，得到了 R-Fe 交换场和稀土晶位的晶场参数的数值[16]．关于这些参数的可靠性，以及与 Yamada 等人[15]和 Givord 等人[1]所确定的参数之间的比较，在文献[16]中做了较详细的说明．用所得到的交换场和晶场参数计算的 $Er_2Fe_{14}B$ 和 $Tm_2Fe_{14}B$化合物在 78K 下高达 550kOe 的外场中的磁化曲线与实验符合得很好[14]．这表明，用上述参数值不仅可以分析R 和 Fe 次晶格的磁化过程，而且进一步可以预测这些重稀土化合物在更高磁场区的磁化特性．

本文将详细分析 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物中，Ho 和 Fe 次晶格在 $T = 0K$ 沿[100]，[1$\bar{1}$0]和[001]轴的磁化过程，并计算预测该化合物在高达 2000kOe 的磁场中的磁化曲线．

二、计 算 方 法

$R_2Fe_{14}B$ 具有四方结构，属于 $P4_2/mnm$ 空间群，其中R 离子占据 f 和 g 晶位[17]．忽

* 国家自然科学基金和中国科学院磁学开放研究实验室基金资助的课题．

略 f 和 g 晶位的差别，则 $R_2Fe_{14}B$ 中有两个磁性不等价R晶位：R(1) 和 R(2)．根据单离子模型，稀土离子要受到晶场、交换场以及外磁场的作用．$R_2Fe_{14}B$ 中每个 R(i) ($i=1,2$) 离子在〈100〉坐标系（z 轴平行于[001]轴）中的哈密顿量可以表示为

$$\mathscr{H}(i)=\mathscr{H}_{CEF}(i)+2(g_J-1)\mu_B\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{H}_{ex}+g_J\mu_B\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{H}, \tag{1}$$

$$\mathscr{H}_{CEF}(i)=B_2^0(i)O_2^0+B_2^{-2}(i)O_2^{-2}+B_4^0(i)O_4^0+B_4^{-2}(i)O_4^{-2}+B_4^4(i)O_4^4+B_6^0(i)O_6^0+B_6^{-2}(i)O_6^{-2}+B_6^4(i)O_6^4+B_6^{-6}(i)O_6^{-6}, \tag{2}$$

$$B_n^m(1)=(-1)^{m/2}B_n^m(2)\quad(n=2,4,6;\ |m|=0,2,4,6;\ |m|\leqslant n). \tag{3}$$

这里 B_n^m 和 O_n^m 分别为晶场参数和 Stevens 等价算符[18,19]；g_J 和 $\boldsymbol{J}$ 分别为朗德因子和总角动量算符；μ_B 为玻尔磁子；$\boldsymbol{H}_{ex}$ 为来自 Fe 次晶格的交换场；$\boldsymbol{H}$ 为外磁场．对于给定的 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{H}_{ex}$，将 $(2J+1)\times(2J+1)$ 维矩阵 $\mathscr{H}(i)$ 对角化，从而得到 R(i) 离子的本征值 $E_n(i)$ 和相应的本征函数 $|n,i\rangle(n=1,2,\cdots,2J+1)$．$R_2Fe_{14}B$ 系统的总自由能为

$$F(\boldsymbol{n},\boldsymbol{H},T)=-kT\sum_{i=1}^{2}\ln Z(i)+K_{Fe}(T)\sin^2\theta_0-\boldsymbol{M}_{Fe}(T)\cdot\boldsymbol{H}, \tag{4}$$

$$Z(i)=\sum_{n=1}^{2J+1}\exp\{-E_n(i)/kT\}. \tag{5}$$

这里 $K_{Fe}(T)$ 和 $M_{Fe}(T)$ 分别为 Fe 次晶格的磁晶各向异性常数和磁矩，θ_0 为 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 与 c 轴之间的角度，$\boldsymbol{n}$ 为交换场 $\boldsymbol{H}_{ex}$ 的单位矢量（与 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 反平行）．计算中交换场 $H_{ex}(T)$ 是按着正比于 $M_{Fe}(T)$ 随温度变化的，即 $H_{ex}(T)/H_{ex}(0)=M_{Fe}(T)/M_{Fe}(0)$，而 $K_{Fe}(T/T_C)$ 和 $M_{Fe}(T/T_c)/M_{Fe}(0)$（T_c 为居里温度）的数值均取自 $Y_2Fe_{14}B$ 的实验结果[20]．根据系统总自由能的极小条件，可以确定 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 的平衡方向．每个 R(i) 离子的磁矩可以由下式给出：

$$\boldsymbol{M}_R(i)=\sum_{n=1}^{2J+1}\boldsymbol{\mu}_n(i)\exp\{-E_n(i)/kT\}/Z(i), \tag{6}$$

$$\boldsymbol{\mu}_n(i)=-g_J\mu_B\langle n,i|\boldsymbol{J}|n,i\rangle. \tag{7}$$

$R_2Fe_{14}B$ 系统的总磁矩为

$$\boldsymbol{M}=-\partial F/\partial\boldsymbol{H}=\sum_{i=1}^{2}\boldsymbol{M}_R(i)+\boldsymbol{M}_{Fe}(T). \tag{8}$$

三、结果与讨论

本文的计算采用下列参数值[16]：$\mu_BH_{ex}(0)=155K$，$B_2^0=-4.44\times10^{-1}K$，$B_2^{-2}=\pm0.68K$，$B_4^0=6.67\times10^{-4}K$，$B_4^{-2}=0K$，$B_4^4=2.09\times10^{-3}K$，$B_6^0=3.63\times10^{-6}K$，$B_6^{-2}=\pm2.07\times10^{-5}K$，$B_6^4=8.15\times10^{-5}K$，$B_6^{-6}=0K$，$M_{Fe}(0)=31.2\mu_B$/f.u.．图1示出 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物的自发磁化 $M(T)$ 随温度变化的计算与实验结果，以及 Fe 和 Ho 次晶格的磁化随温度的变化．计算表明，$M(T)$ 曲线主要反映了 Ho-Fe 交换作用的强度，晶场作用的影响很小．图2示出 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物磁化曲线的计算（$T=0K$）和实验（$T=4.2K$）结果．在 4.2K 易磁化方向偏离 c 轴的角度的计算值为 23.4°，实验

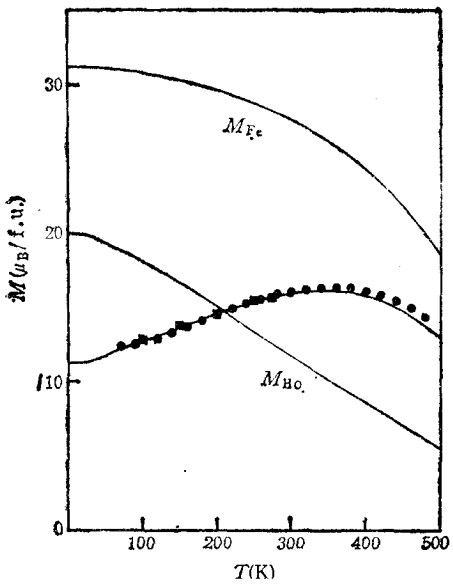


图 1　$Ho_2Fe_{14}B$ 化合物自发磁化随温度的变化以及 Fe 和 Ho 次晶格磁化随温度的变化
——为计算值；　■为实验值[1]；　●为实验值[19]

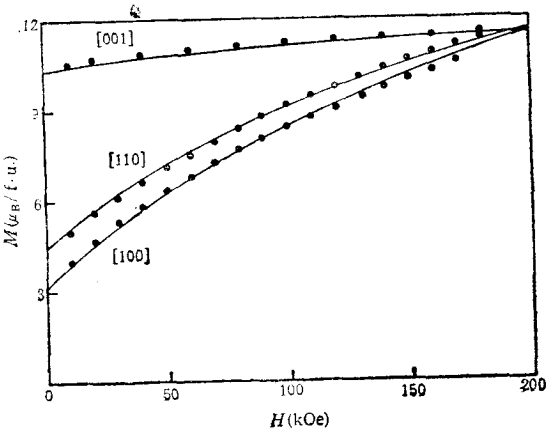
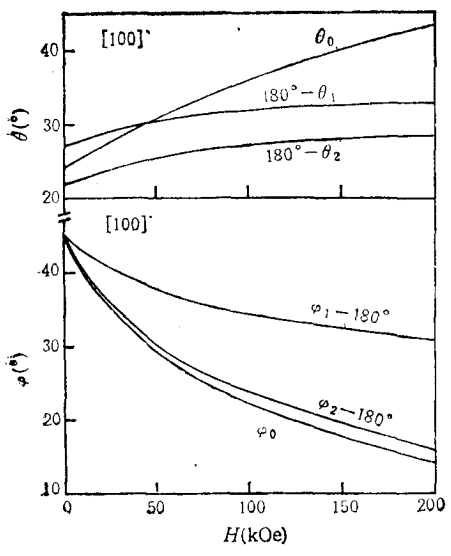


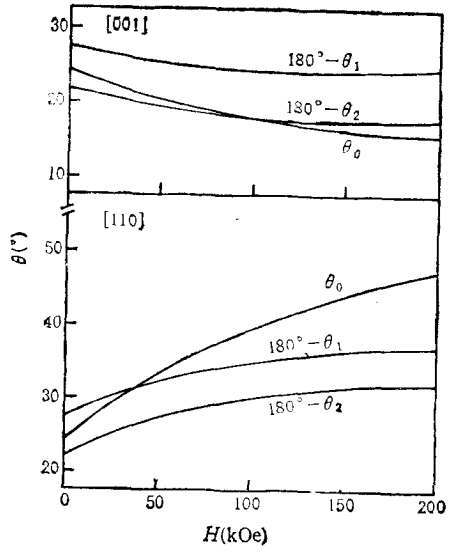
图 2　$Ho_2Fe_{14}B$ 化合物的磁化曲线
——为计算值 ($T = 0$K)；　●为实验值 ($T = 4.2$K)[1]

值为 23°[1]。自旋重取向温度的计算值为 58K，实验值为 57—58K[1,20]。在 300K，各向异性场的计算值为 105kOe，与用 SPD（奇异点检测）技术对多晶样品观测的结果一致[21]。

图 3(a) 示出沿[100]轴磁化时，θ_0，$180° - \theta_i$，φ_0，$\varphi_i - 180°$ ($i = 1, 2$) 随 H 的



(a) 沿[100]轴磁化时 θ_0，$180°-\theta_1$，$180°-\theta_2$ φ_0，$\varphi_1-180°$，$\varphi_2-180°$ 随 H 的变化



(b) 沿[110]和[001]轴磁化时 θ_0，$180°-\theta_1$，$180°-\theta_2$，随 H 的变化

图 3

变化. 这里 θ_i 为 $\boldsymbol{M}_{Ho}(i)$ 与 c 轴之间的角度，φ_0 和 φ_i 分别为 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(i)$ 的方位角. 图 3(b)示出沿[110]和[001]轴磁化时，θ_0 和 $180°-\theta_i$ 随 H 的变化. 沿这两个轴磁化时，$\boldsymbol{M}_{Fe}$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(i)(i=1,2)$ 都在$(1\bar{1}0)$平面内转动，即 $\varphi_0=\varphi_1-180°=\varphi_2-180°=45°$. 从图 3 可以看出，磁化过程中 $\boldsymbol{M}_{Fe}$，$\boldsymbol{M}_{Ho}(1)$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(2)$ 之间存在明显的非共线性.

图 4 示出 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物在 $T=0K$ 高达 2000kOe 的磁场中沿[100]，[110]和[001]轴的磁化曲线. 当沿[100]轴磁化时，磁化随 H 的增加而连续增加. 在大约 1100kOe 处，$\boldsymbol{M}_{Fe}$ 转到(010)平面内，$\boldsymbol{M}_{Ho}(1)$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(2)$ 转到以(010)平面为对称面的位置，即 $\varphi_0=0$，$\varphi_1=-\varphi_2$. 在 H 接近 1560 kOe 时，磁化急剧增加，而后 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 转到[100]方向，即 $(\theta_0,\ \varphi_0)=(90°,\ 0°)$，$\boldsymbol{M}_{Ho}(1)$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(2)$ 转到(001)平面内，即 $\theta_1=\theta_2=90°$，但 $\varphi_1=-\varphi_2\neq 0$，系统处于非共线铁磁结构. 当 H 分别为 1600 和 2000kOe 时，$\varphi_1=-\varphi_2$ 分别为 10.0° 和 6.4°. 沿[110]轴磁化时，磁化曲线在 660kOe 处出现小的跳跃，这是由于 $\boldsymbol{M}_{Fe}$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(i)(i=1,2)$ 此时突然偏离$(1\bar{1}0)$平面. 在大约 1000kOe 处 $\boldsymbol{M}_{Fe}$，$\boldsymbol{M}_{Ho}(1)$ 和 $\boldsymbol{M}_{Ho}(2)$ 又都转到$(1\bar{1}0)$平面内. 在 H 大于 1900kOe 以后，所有磁矩都转到外场方向. 图 5(a) 示出沿[110]轴磁化时在某些磁场下 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物的磁结构. 沿[001]轴磁化时，所有磁矩都在$(1\bar{1}0)$平面内转动. 在 $H_{cr}=795kOe$ 处出现一级磁化过程，此时所有磁矩出现不连续转动. 在出现一级磁化过程前后系统磁结构的主要差别是：$H<H_{cr}$ 时，θ_1 和 θ_2 都大于 90°；而 $H>H_{cr}$ 时，θ_1 和

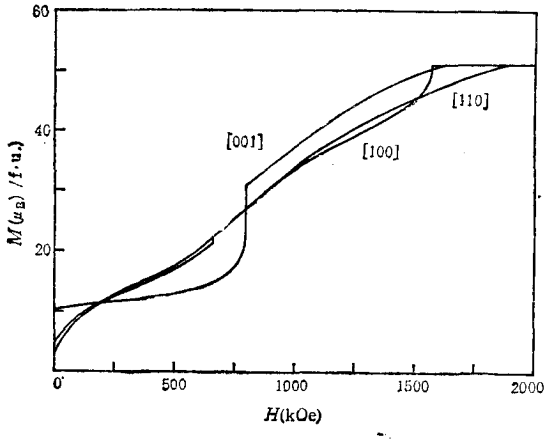


图 4 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物在 $T=0K$ 沿主晶轴的磁化曲线。

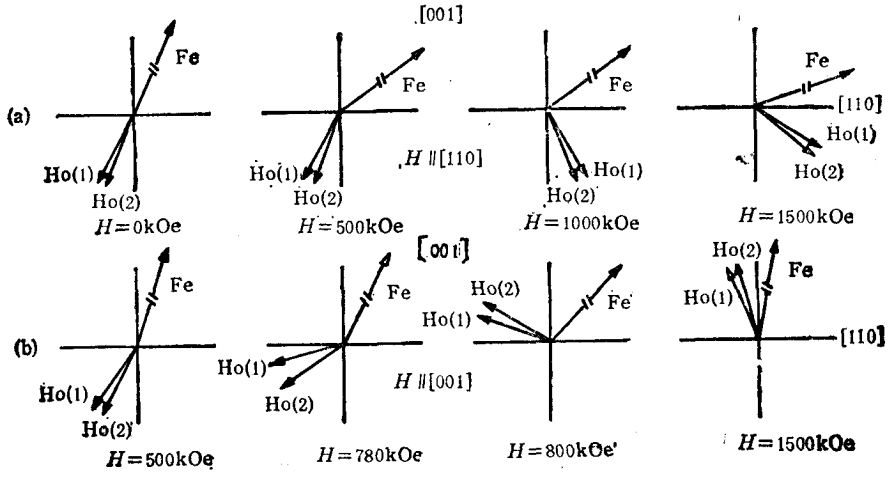


图 5 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物在 $T=0K$ 沿[110](a) 和[001](b)轴磁化过程中，在某些磁场下的磁结构

θ_2 都小于 90°。例如 $H = 790$kOe 时，$\theta_0 = 29.1°$，$\theta_1 = 95.8°$，$\theta_2 = 120.0°$；$H = 800$ kOe 时，$\theta_0 = 43.4°$，$\theta_1 = 70.6°$，$\theta_2 = 59.6°$。图 5(b)示出沿[001]轴磁化时在某些磁场下 $Ho_2Fe_{14}B$ 化合物的磁结构。当H大于 1600kOe 以后，所有磁矩都转到外场方向。

本文作者之一赵铁松感谢吉林大学青年科学基金的资助。

[1] D. Givord, H. S. Li, J. M. Cadogan, J. M. D. Coey, J. P. Gavigan, O. Yamada, H. Maruyama, M. Sagawa and S. Hirosawa, *J. Appl. Phys.*, **63**(1988), 3713.

[2] H. Hiroyoshi, N. Saito, G. Kido, Y. Nakagawa, S. Hirosawa and M. Sagawa, *J. Magn. Magn. Mater.*, **54—57**(1986), 583.

[3] J. P. Gavigan, D. Givord, H. S. Li, O. Yamada, H. Maruyama, M. Sagawa and S. Hirosawa, *J. Magn. Magn. Mater.*, **70**(1987), 416.

[4] G. Kido, S. Kajiwara, Y. Nakagawa, S. Hirosawa and M. Sagawa, *IEEE Trans. Magn.*, **MAG -23**(1987), 3107.

[5] Y. Nakagawa, G. Kido, H. Hiroyoshi, H. Kato, M. Yamada, S. Hirosawa and M. Sagawa, Proc. 5th Int. Symp. on Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare Earth-Transition Metal Alloys, Bad Soden, FRG, September 3, (1987), p. 87.

[6] S. Sinnema, R. Verhoef, J. J. M. Franse and F. R. de Boer, *ibid.*, p. 69.

[7] L. Pareti, F. Bolzoni and O. Moze, *Phys. Rev.*, ***B*32**(1985), 7604.

[8] S. Kajiwara, G. Kido, Y. Nakagawa, S. Hirosawa and M. Sagawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **56**(1987), 829.

[9] F. Bolzoni, O. Moze and L. Pareti, *J. Appl. Phys.*, **62**(1987), 615.

[10] J. M. Cadogan, J. P. Gavigan, D. Givord and H. S. Li, *J. Phys. F* **18**(1988), 779.

[11] H. Hiroyoshi, H. Yamauchi, Y. Yamaguchi, H. Yamamoto, Y. Nakagawa and M. Sagawa, *Solid State Commun.*, **54**(1985), 41.

[12] G. Kido, H. Kato, M. Yamada, Y. Nakagawa, S. Hirosawa and M. Sagawa, *J. Phys. Soc. Jnp.*, **56**(1987), *4635*.

[13] H. Hiroyoshi, H. Kato, M. Yamada, N. Saito, Y. Nakagawa, S. Hirosawa and M. Sagawa, *Solid State Commun.*, 62(1987), 475.

[14] Zhao Tiesong and Jin Hanmin, *J. Phys.: Condensed Matter*, 1(1989), 8523.

[15] M. Yamada, H. Kato, H Yamamoto and Y. Nakagawa, *Phys. Rev.*, **B38** (1988), 620.

[16] Zhao Tiesong, Jin Hanmin and Zhu Yong, *J. Magn. Magn. Mater.*, 79(1989), 159.

[17] J. F. Herbst, J. J. Croat, F. E. Pinkerton and W. B. Yelon, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 4176.

[18] M. T. Hutchings, *Solid State Physics*, Vol. 16, New York, Academic, (1964), p. 227.

[19] R. Orbach, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, **264**(1961), 458.

[20] S. Hirosawa, Y. Matsuura, H. Yamamoto, S. Fujimura, M. Sagawa and H. Yamauchi, *J. Appl. Phys.*, **59** (1986), 873.

[21] R. Grössinger, X. K. Sun, R. Eibler, K. H. J. Buschow and H. R. Kirchmayr, *J. Magn. Magn. Mater.*, **58**(1986), 55.

HIGH-FIELD MAGNETIZATION PROCESS OF $Ho_2Fe_{14}B$ COMPOUND

ZHAO TIE-SONG JIN HAN-MIN

Department of Physics, Jilin University, Changchun, 130023

(Reiceived 26 August 1989)

ABSTRACT

The magnetization processes of the Ho and Fe sublattices in $Ho_2Fe_{14}B$ compound along the [100], [110] and [001] axes at 0 K are analysed in detail by the calculation based on the single-ion model. The high-field magnetization processes of $Ho_2Fe_{14}B$ at 0 K along the principal crystal axes in a field up to 2000 kOe are predicted by the calculation.

PACC: 7530G; 7560E; 7550G; 7510D