

超交换作用对 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的磁特性的影响^{*}

张锡娟¹⁾ 成海英^{1,2)} 杨翠红¹⁾ 王 维¹⁾

¹⁾扬州大学物理科学与技术学院,扬州 225002)

²⁾盐城工学院基础部,盐城 224002)

(2003 年 4 月 11 日收到,2003 年 7 月 18 日收到修改稿)

考虑交换作用有效场的影响,计算了外磁场沿着[100]和[111]方向 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 的磁化强度,得到了与实验较符合的结果,证明在 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ 中,超交换作用是不可忽略的因素.

关键词:交换作用,磁化强度,磁场

PACC:7530G,7560E,7430C

1. 引 言

关于顺磁物质磁化满足居里-外斯定律已为大家所熟知.近年来顺磁物质在低温区域、强场条件下表现出一系列特殊的行为成为人们关心的新热点^[1-6].对顺磁晶体的量子理论解释,通常考虑晶场、自旋-轨道耦合、塞曼作用共同引起磁性离子基态能级的劈裂,从而导致宏观介质的磁化.徐游等人在计算顺磁氟化物法拉第旋转与磁化率时,发现理论值和实验值有偏差,尤其是低温情况下,其偏差较大.在研究 CeF_3 的磁化时,他们引入了“附加磁场”,并通过理论计算得到与实验较为符合的结论^[7,8].Liu 等人,在他们提出的顺磁物质的量子理论中,提到必须考虑磁性离子电子自旋间的“超交换”这一被忽略的作用^[5],并根据此设想,计算了 NdF_3 在 70—300K 温度下介质的磁化,其理论与实验的结果较为一致^[9,10].我们已经用量子理论,考虑晶场、自旋-轨道耦合、塞曼作用,计算了 $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ (ErGaG) 的磁化强度与外场的关系.取得了外磁场沿[100]方向、低温(4.2K)、磁场在 $0-1.2 \times 10^8$ ($4\pi^{-1}$) $\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$ 范围内,理论值与实验结果符合得较好.但在磁场大于 1.2×10^8 ($4\pi^{-1}$) $\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$ 时,理论与实验的结果有明显差异^[11].本文在文献[11]的基础上,考虑了超交换作用对 ErGaG 在强磁场、低温下的磁化强度进行了定量计算,得到了与实验结果较为

符合的结论.说明 ErGaG 在强磁场、低温情况下,超交换作用也是一个不可忽略的因素.

2. 理论与计算

在弱磁场情况下, ErGaG 中 Er^{3+} 离子的哈密顿量通常可以表示为如下几项:

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

式中 H_0 为自由离子的哈密顿量, H_c 是晶场作用, H_{so} 是自旋-轨道耦合作用, H_{ex} 是外磁场的作用.低温下,我们根据刘公强著《磁光学》考虑超交换作用,其有效场可以写为^[12]

$$H_v = \gamma M, \quad (2)$$

γ 为与超交换有关的系数.根据磁化强度与外场的关系(2)式改写为

$$H_v = \gamma \chi H_e = \chi_m H_e, \quad (3)$$

χ_m 称为物质的等效磁化率.因而,在考虑了超交换作用后的哈密顿量形式为

$$H = H_0 + H_c + H_{so} + H'_{ex}, \quad (4)$$

式中 $H'_{ex} = -\mu_B H_e \cdot (L + 2S) - \mu_B \chi_m 2S \cdot H_e$.

由于实验结果表明 ErGaG 在低温、强磁场作用下,其磁化强度随外磁场在不同的方向均显示出非线性特征,故我们认为 χ_m 应该是一个与外磁场有关的量.

通过解久期方程

^{*}江苏省教育厅基金(批准号:JK0310062)和国家自然科学基金(批准号:60072032和79970121)资助的课题.

$$\| \varphi_i | H_0 + H_c + H_{so} + H'_{ex} | \varphi_j - E_g \delta_{ij} \| = 0, \quad (5)$$

得到能级和波函数,并通过计算基态粒子占有概率得到离子磁矩

$$\bar{m} = -\mu_B \sum_g g | (L_z + 2S_z) | g \rho_g. \quad (6)$$

3. 结果与讨论

将物质的等效磁化率用展开式表示为

$$\chi_m = a + bH_c + cH_c^2, \quad (7)$$

其中 a, b, c 均为拟合常数. 图 1 为外磁场沿 [100] 方向时温度为 4.2K 考虑超交换作用和不考虑超交换作用时,计算所得磁化强度值与实验值的比较. (7)式中的参量分别取 $a = -1.58, b = -1.26 \times 10^{-2}, c = 5.53 \times 10^{-5}$. 由图 1 可以看出,磁场沿 [100] 方向时,在不考虑超交换作用的影响时,其理论计算值与实验值在很大的范围内是存在相当的误

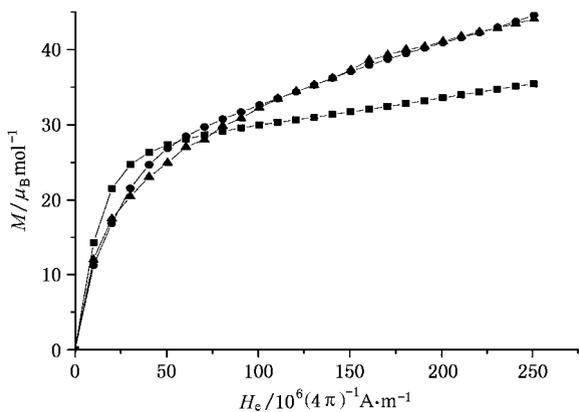


图 1 外磁场沿 [100] 方向, $T = 4.2\text{K}$ 时磁矩随外磁场 H 的变化关系 —■— 为不考虑超交换作用的计算值; —●— 为考虑超交换作用的计算值; —▲— 为实验值

差的. 仅仅在弱磁场下,符合较好. 当作上述修正后,磁场在 $0-2.5 \times 10^8 (4\pi)^{-1} \text{A} \cdot \text{m}^{-1}$ 的范围内均符合很好. 这说明,由于基态的能级分布与晶场、自旋-轨道耦合以及 Zeeman 效应有密切关系. 在外场大于 $5.0 \times 10^7 (4\pi)^{-1} \text{A} \cdot \text{m}^{-1}$ 时,在 4.2K 温度下粒子几乎全部占据最低一条能级,使得磁化强度基本达到饱和. 考虑了交换作用以后,外磁场在较弱的情况下,各能级间的差值趋于减小,使得在 4.2K 温度下,粒子不仅占据最低能级,其他的较高能级对磁化也有所贡献. 我们知道, Er^{3+} 离子在 ErGaG 中有六种不同的晶位. 表 1 所给出的能级仅仅是 C_1 晶座的

情况,其他五个晶座的能级与此有类似的情况. 由此可见,在强磁场作用下,磁场沿 [100] 方向磁化时,超交换作用对离子的磁矩有一定的影响.

表 1 磁场沿 [100] 方向, C_1 晶座基组态的最低两条能级能量随外磁场的变化情况 (cm^{-1})

外磁场/ $10^6(4\pi)^{-1}\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$	0	50	100	150	200	250
不考虑超交换作用	-24.366	-41.155	-60.609	-80.677	-101.04	-121.56
最低两条能级/ cm^{-1}	-24.366	-28.716	-42.792	-58.749	-75.55	-92.81
考虑超交换作用	-24.366	-28.794	-31.602	-36.966	-50.437	-78.165
最低两条能级/ cm^{-1}	-24.366	-22.759	-23.462	-26.126	-35.152	-56.709

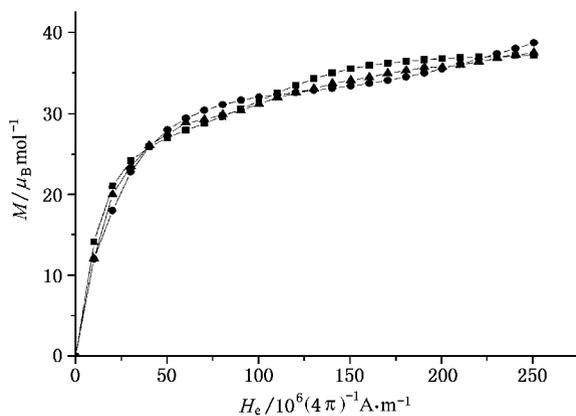


图 2 外磁场沿 [111] 方向, $T = 4.2\text{K}$ 时磁矩随外磁场 H 的变化关系 —■— 为不考虑超交换作用的计算值; —●— 为考虑超交换作用的计算值; —▲— 为实验值

表 2 不同外磁场时有效场的值

$H_c / 10^6 (4\pi)^{-1} \text{A} \cdot \text{m}^{-1}$	0	50	100	150	200	250
$ H_v / 10^6 (4\pi)^{-1} \text{A} \cdot \text{m}^{-1}$	0	101.841	214.731	319.717	397.848	430.172

图 2 给出了磁场沿 [111] 方向时,考虑超交换作用的影响后,对理论计算值的修正以及与实验值的比较. 同样可以发现,超交换作用使得计算值与实验值的误差更小.

在我们计算中发现有效场 H_v 在数量级上与外磁场接近,见表 2. 文献 [8] 指出,对于计算仅限于在一个多重态内的情况,算符 $L_z + 2S_z$ 与算符 S_z 成正比. 在我们的计算中由于 $J = 15/2$ 和 $J = 13/2$ 两个多重态之间的耦合非常弱,因此只考虑了 $J = 15/2$ 的一个多重态. 由 (4) 式中 H'_{ex} 的表达式,可以认为,仿照分子场引进的有效场仅作用于自旋,外场对自旋的作用与有效场对自旋的作用是同数量级的,而

外场对轨道的作用是比较大的. 当外磁场沿不同方向时, 超交换作用的影响不相同, 其微观机理还不太清楚, 需要继续研究.

特别感谢扬州大学顾长华教授所给予的指导和有益的讨论.

- [1] Li Y B *et al* 2002 *Chin. Phys.* **11** 174
 [2] Zhao P *et al* 2002 *Chin. Phys.* **11** 955
 [3] Zhou Q C *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1639 [周青春等 2002 物理学报 **51** 1639]
 [4] Shen B G *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 818 [沈保根等 1998 物理学报 **47** 818]
 [5] Guillot M, Schmiedel T and Xu Y 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 6762
 [6] Guillot M, Schmiedel T and Xu Y 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 5097
 [7] Xu Y and Duan M Q 1992 *Phys. Rev. B* **46** 11636
 [8] Zhang H Q *et al* 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 1193 [张惠奇等 1991 物理学报 **40** 1193]
 [9] Liu G Q, Huang Y P and Yu Z Q 1989 *Phys. Rev. B* **41** 749
 [10] Liu G Q, Yuan B, Zhang N G and Gong Y X 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 4054
 [11] Wang W *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2846 [王维等 2002 物理学报 **51** 2846]
 [12] Liu G Q *et al* 2001 *Theory of Magneto-optical* (Shanghai :Shanghai Science and Technological Publishing House) 79 [刘公强等 2001 磁光学 (上海 :上海科技出版社) 第 79 页]

The role of super-exchange in magnetic properties of paramagnetic $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ *

Zhang Xi-Juan¹⁾ Cheng Hai-Ying^{1,2)} Yang Cui-Hong¹⁾ Wang Wei¹⁾

¹⁾ College of Physics Science & Technology, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

²⁾ Department of Basic Course, Yancheng Institute of Technology, Yancheng 224002, China)

(Received 11 April 2003 ; revised manuscript received 18 July 2003)

Abstract

Magnetization of $\text{Er}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ is calculated at low temperatures and high magnetic field by using quantum theory. Through quantitative calculation, its magnetization is proved to be complex and anisotropic when the magnetic field is applied parallel to [100] or [111] directions. It can be concluded that super-exchange of paramagnetic is an important factor on the magnetic properties.

Keywords : exchange interaction, magnetization, magnetic field

PACC : 7530G, 7560E, 7403C

* Project supported by the Foundation of the Education Bureau of Jiangsu Province, China (Grant No. GK0310062), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60072032 and 79970121).