

Магнитные структуры и фазовые переходы в кристаллах со структурой NaCl

Кассан-Оглы Ф.А., Филиппов Б.Н.



Предложена ревизованная схема вывода возможных антиферромагнитных структур в ГЦК решетке при учете взаимодействий ближайших и вторых соседей. Развита модель одновременных магнитных и структурных фазовых переходов первого рода для антиферромагнетиков со структурой NaCl и сильной кубической магнитной анизотропией на основе синтеза магнитной модифицированной модели Поттса и теоретических моделей структурных фазовых переходов в кубических кристаллах. Показано, что высокотемпературное диффузное магнитное рассеяние нейтронов превращается в магнитные Брэгговские рефлексы при переходе через точку Нееля.

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал по магнитным структурам и свойствам множества бинарных соединений типа AX со структурой NaCl, называемых монониктидами и монохалькогенидами, где A - редкоземельный элемент или актинид, а X - элемент V или VI групп (UN, HoP, CeBi, EuS, UTe, GdSe и т.д.), а также тройных соединений с частичной заменой как анионов, так и катионов. Соединения этого класса обладают целым набором весьма необычных свойств, не получивших адекватного объяснения в рамках существующих теоретических моделей и подходов. Не достигают цели неоднократные попытки разных авторов объяснить даже самые основные экспериментальные факты, такие как перекрещивающиеся кривые намагничивания антиферромагнетиков

в различных кристаллографических направлениях, сильное различие намагниченностей насыщения в них, необычный ход полевой зависимости восприимчивости, сложные диаграммы магнитных состояний в зависимости от температуры и внешнего магнитного поля и многое другое. Не находит своего объяснения и наличие специфического магнитного диффузного рассеяния выше точек магнитных фазовых переходов. Монониктиды и монохалькогениды при высоких температурах обладают кубической структурой типа NaCl, причем магнитные катионы образуют ГЦК решетку, вставленную в ГЦК решетку анионов, так что магнитные катионы находятся в октаэдрическом окружении из немагнитных анионов.

Целью настоящей работы является вывод возможных магнитных структур в ГЦК решетке

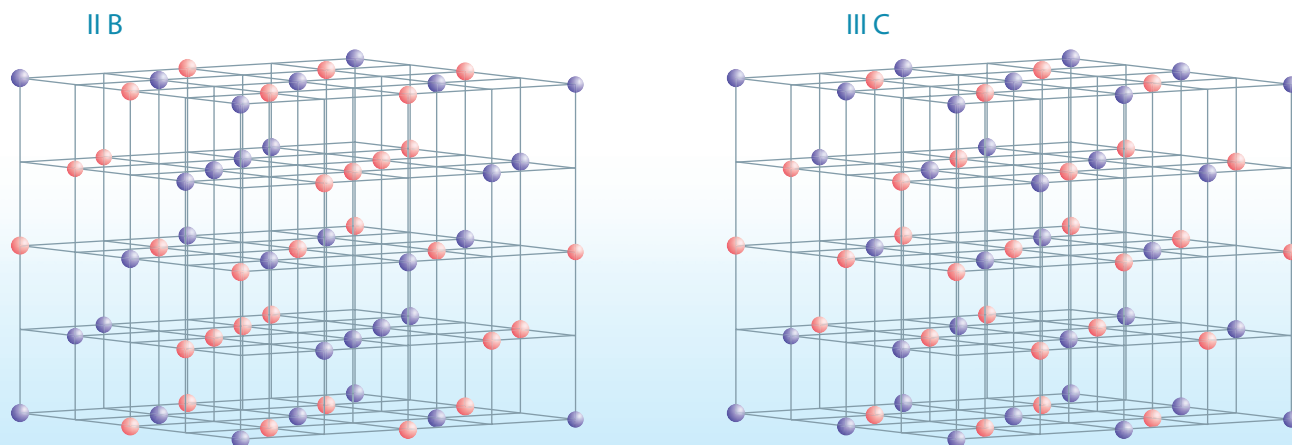


Рис.1.

Новые магнитные структуры в ГЦК решетке

(классификация структур соответствует монографии [1]) с учетом взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями, а также построение теории магнитных и структурных свойств таких магнетиков. В качестве исходной мы используем не стандартную изотропную модель Гейзенберга, а предельно анизотропную модифицированную шестивершинную модель Поттса [2].

За неимением точного решения для статсуммы и корреляционной функции трехмерной мо-

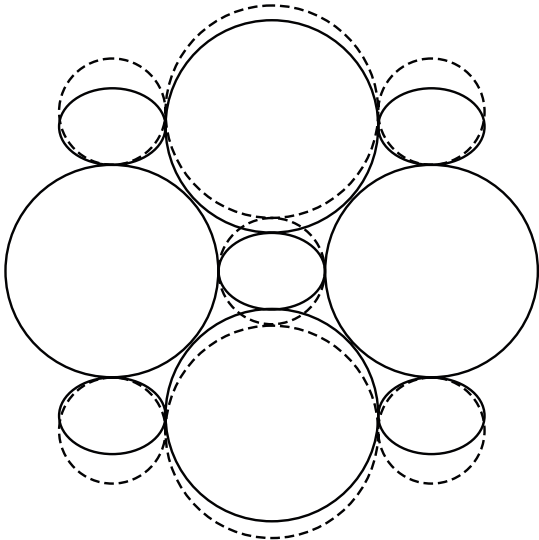


Рис.2.

Кристаллогеометрия фазового перехода. Лицевая грань ячейки. Штриховыми линиями показаны атомы в высокотемпературной фазе. Сплошными – в низкотемпературной

дели Поттса воспользуемся методом, изложенным в работах по теории диффузного рассеяния и структурным фазовым переходам (см., например, обзор [3]). Сократим число всевозможных конфигураций, оставляя энергетически самые выгодные, в которых все спины в каждой из плоскостей типа {001} параллельны. В результате задача сводится к нахождению решения для системы трех взаимосвязанных параметров порядка и трех корреляционных функций для одномерных моделей Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями.

Численное решение этой системы дает общую картину происходящих в кристалле явлений, позволяет описать одновременные магнитный (парамагнетик-А1) и структурный (куб-тетрагон) фазовые переходы, рассчитать температурную зависимость диффузного магнитного рассеяния, возникновение магнитных рефлексов при фазовых переходах, их положение в обратном пространстве и интенсивность, тем самым давая возможность детально описывать и предсказывать особенности магнитных структур. Следует особо отметить, что обычно принятое противопоставление диффузного магнитного рассеяния, часто называемого критическим рассеянием, и магнитных рефлексов по сути дела неправильно. Считается также, что такое рассеяние возникает только при приближении к точке фазового перехода, но это не так. Диффузное рассеяние существует при любой, сколь угодно высокой температуре, и интегральная интенсивность диффузного рассеяния и магнитных рефлексов одна и та же. Подробное изложение материала можно найти в статьях [4] и [5].

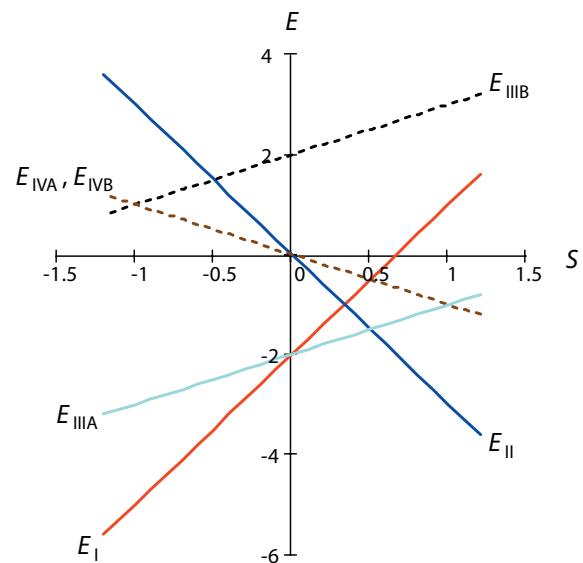


Рис.3.

Энергии магнитных структур как функции отношения обменных параметров $s=J'/J$.

¹ Ю.А. Изюмов, В.Е. Найш, и Р.П. Озеров, *Нейтроннография магнетиков*, (1981), Москва, Атомиздат.

² F.A. Kassan-Ogly, *Phase Transitions*, 72 (2000) 223.

³ F.A. Kassan-Ogly, V.E. Naish, and I.V. Sagaradze, *Phase Transitions*, 49 (1994) 89.

⁴ F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, *JMMM*, 300 (2006) e559.

⁵ Ф.А. Кассан-Оглы, Б.Н. Филиппов, *Физика металлов и металловедение* 100 (2005) 15.