

## СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КУБИЧЕСКИХ СПЛАВАХ ЛАВЕСА $Sc_{1-x}Y_xFe_2$

*В. С. Покатилов\**

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики  
(технический университет)  
119454, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 июля 2002 г.

Исследовались эффекты гибридизации  $3d$ -зон железа с  $3d$ -зонами скандия и  $4d$ -зонами иттрия в кубических сплавах Лавеса  $Sc_{1-x}Y_xFe_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) методом ядерного магнитного резонанса. Измерены концентрационные зависимости параметров решетки  $a$ , удельной намагниченности насыщения  $\sigma$ , а также сверхтонких полей на ядрах  $^{57}Fe$ ,  $^{45}Sc$ ,  $^{89}Y$  и примесных ядрах  $^{27}Al$ , атомы которых занимают места атомов железа в решетке исследуемых сплавов. Выделены «локальный» и «наведенный» вклады в сверхтонкие поля на ядрах  $^{57}Fe$  и оценены магнитные моменты на атомах железа. Установлено, что эффект гибридизации приводит к формированию магнитных моментов на атомах скандия и иттрия, направленных противоположно магнитным моментам на атомах железа, и к ферримагнитной структуре в сплавах  $Sc_{1-x}Y_xFe_2$ .

PACS: 76.60.-k, 75.25.+z

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы железа с редкоземельными элементами типа  $RFe_2$ , которые называют соединениями Лавеса, на протяжении многих лет привлекают внимание исследователей, так как они являются основой многих магнитных материалов, имеющих широкое применение, а также вызывают большой интерес исследователей для изучения взаимодействий атомов железа и редкоземельных элементов. Одним из таких взаимодействий является гибридизация  $3d$ -зон атомов железа и  $3d$ -зон атомов скандия в этих сплавах ( $R = Sc$ ),  $3d$ -зон атомов железа и  $4d$ -зон атомов  $R = Y, Zr, Nb, Mo$ ,  $3d$ -зон атомов железа и  $5d$ -зон атомов в сплавах Лавеса  $RFe_2$  ( $R = Ce - Lu$ ) [1–7]. Как показано в работах [1–7], эффект гибридизации приводит к образованию магнитных моментов на атомах  $Sc, Y, Zr, Nb$ , направленных противоположно магнитному моменту атомов железа, к ферримагнитной структуре в таких сплавах. В соединениях Лавеса железа с  $R$ -атомами ( $Ce, Gd, Tb, Lu$ ), содержащими  $4f5d$ -электроны, за счет гибридизации  $3d$ -зон железа и  $5d$ -зон атомов  $R$

на редкоземельных атомах появляется дополнительный (кроме магнитного момента от  $4f$ -электронов) отрицательный магнитный момент. Однако экспериментальных данных, подтверждающих появление отрицательных магнитных моментов на  $R$ -атомах, крайне мало. Были обнаружены и измерены отрицательные магнитные моменты на редкоземельных атомах в соединениях  $RFe_2$  ( $R = Y, Zr, Ce, Lu$ ) методом поляризованных нейтронов [8–11], а для  $R = Sc, Y, Zr, Ce, Lu, Gd$ -методом ЯМР [12–15]. Показано, что в соответствии с теоретическими расчетами эти сплавы имеют ферримагнитную структуру, а магнитные моменты  $\mu(R)$  на атомах  $R$ , измеренные этими двумя методами, с учетом особенностей этих методов находятся в хорошем согласии. Эффект гибридизации  $3d$ -зон железа и  $d$ -зон редкоземельных атомов в тройных сплавах Лавеса с различными редкоземельными атомами  $(R_{1-x}R'_x)Fe_2$  практически не изучался. Имеется только одна работа [15], где были исследованы эффекты гибридизации в сплавах Лавеса  $(Sc,Zr)Fe_2$  с помощью метода ЯМР. В ней показано, что в узлах решетки, занимаемых атомами скандия и циркония, появляются отрицательные магнитные моменты, а также была измерена их концентрационная зависимость.

\*E-mail: pokatilov@mirea.ru

Цель настоящей работы — исследование эффекта гибридизации  $3d$ -зон железа с  $3d$ -зонами скандия и  $4d$ -зонами иттрия в тройных сплавах Лавенса  $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  с кубической структурой в области концентраций  $0 \leq x \leq 1$ . Эффект гибридизации может приводить к изменению магнитных моментов на атомах железа, появлению магнитных моментов на атомах редкоземельных элементов и изменению сверхтонких полей на ядрах, которые существенно зависят от величины магнитных моментов на магнитных атомах. Для обнаружения этого эффекта измерялись сверхтонкие поля (методом ЯМР) на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{45}\text{Sc}$  и  $^{89}\text{Y}$ , а также примесных ядер  $^{27}\text{Al}$  ( $< 1$  ат.%), атомы которых занимают места атомов железа в этих соединениях.

В настоящее время из литературных данных относительно системы  $(\text{Sc},\text{Y})\text{Fe}_2$  известно следующее. Расчеты электронных структур показали, что за счет эффекта гибридизации на атомах Sc в  $\text{ScFe}_2$  (с гексагональной структурой  $\text{MgZn}_2$ ) [1, 4] и атомах Y в  $\text{YFe}_2$  [2–4] возникают магнитные моменты, направленные противоположно магнитному моменту атомов железа  $\mu(\text{Fe})$ , причем для  $\text{ScFe}_2$  получаем  $\mu(\text{Fe}_1) = 1.54\mu_B$ ,  $\mu(\text{Fe}_2) = 1.60\mu_B$  (в соединении для  $\text{ScFe}_2$  с гексагональной структурой типа  $\text{MgZn}_2$  имеются два неэквивалентных кристаллографических состояния железа) и  $\mu(\text{Sc}) = -0.52\mu_B$ , а для  $\text{YFe}_2$  имеем  $\mu(\text{Fe}) = 1.71\mu_B$  и  $\mu(\text{Y}) = -0.49\mu_B$ . Существуют также данные о магнитных моментах железа и иттрия, измеренных методом поляризованных нейтронов, в сплаве  $\text{YFe}_2$ :  $\mu(\text{Fe}) = (1.77 \pm 0.08)\mu_B$  и  $\mu(\text{Y}) = (-0.67 \pm 0.04)\mu_B$  [8]. С помощью метода ЯМР в работах [12–14] были оценены магнитные моменты на атомах железа, скандия и иттрия в сплавах  $\text{ScFe}_2$  (с кубической структурой типа  $\text{MgCu}_2$ ) и  $\text{YFe}_2$ . Для соединения  $\text{ScFe}_2$  было получено  $\mu(\text{Fe}) = 1.56\mu_B$  и  $\mu(\text{Sc}) = -(0.97 \pm 0.05)\mu_B$ , а в  $\text{YFe}_2$  имеем  $\mu(\text{Fe}) = 1.71\mu_B$  и  $\mu(\text{Y}) = -(0.52 \pm 0.05)\mu_B$ .

## 2. ОБРАЗЦЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

Слитки сплавов  $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$  и  $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$  весом по 5–7 г были выплавлены из высокочистых металлов в атмосфере высокочистого аргона в аргонно-дуговой печи. В атмосфере аргона слитки размельчались и прессовались в таблетки и снова переплавлялись. Для получения однородных образцов эта процедура выполнялась три раза. Термообработка образцов не проводилась, чтобы исключить появление вторых фаз в сплавах  $\text{ScFe}_2$  из-за наблюдаемого в них

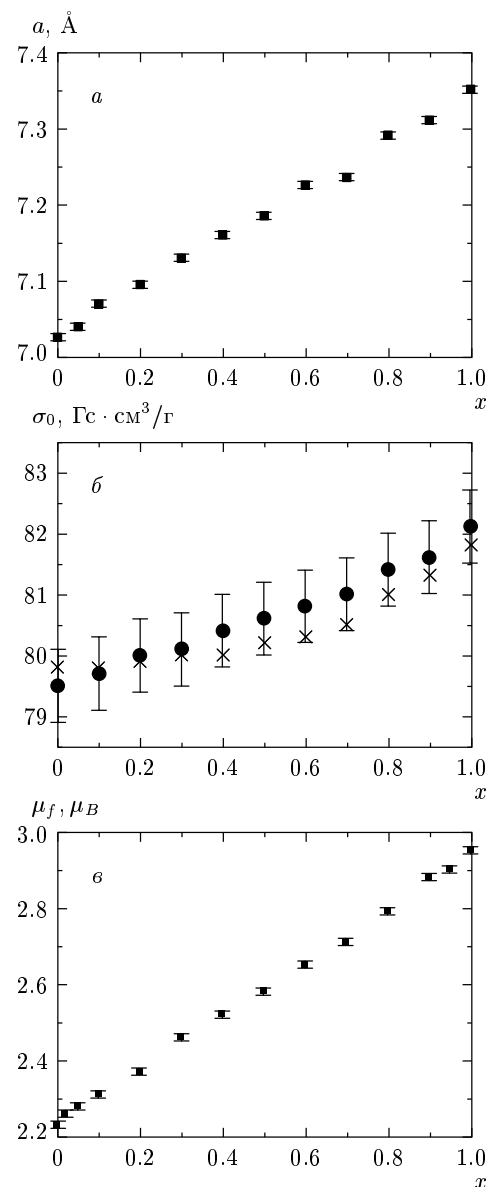


Рис. 1. Концентрационные зависимости а) параметров решетки  $a$  при 293 К, б) удельной намагниченности  $\sigma$  (77 К) ( $\times$  —  $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$ ,  $\bullet$  —  $(\text{Sc},\text{Y})\text{Fe}_2$ ) и в) магнитного момента на формульную единицу соединения,  $\mu_f$

полиформизма [16]. Добавки иттрия в  $\text{ScFe}_2$  в количестве  $\geq 2$  ат.% стабилизировали кубическую структуру  $\text{ScFe}_2$  и исключали полиморфные превращения в этом соединении. Получение сплавов  $\text{ScFe}_2$  с кубической структурой обеспечивалось также тем, что при выплавке этого сплава использовался избыток скандия (3.5 ат.%) по отношению к содержанию скандия в стехиометрическом составе, как описано в работе [16]. Образцы для исследо-

вания представляли собой порошки с размером частиц менее 70 мкм, приготовленные в атмосфере аргона. Кристаллическая структура сплавов и параметр решетки измерялись при комнатной температуре методом рентгенографии. Химический и плазменно-спектральный анализы показали, что с точностью до 0.2 ат. % исследуемые образцы имели заданные составы. Намагниченность насыщения  $\sigma$  была измерена при 77 К в магнитных полях вплоть до 15 кЭ с помощью вибрационного магнитометра с компенсирующей катушкой. Точность измерения  $\sigma$  определялась из разброса ее значений, измеренных на четырех образцах для каждого состава, и составляла менее 2 %. Спектры ЯМР определялись при температуре 4.2 К методом импульсного ЯМР по точкам в области частот 10–130 МГц с использованием калибровки усиления в усилительных блоках и измерения амплитуды высокочастотных импульсов, возбуждающих сигнал эха, в каждой точке спектра ЯМР. Экспериментальные условия возбуждения ядерного спинового эха и измерения частотной зависимости амплитуд эха  $A(f)$  были такие, что  $A \propto f^2$ .

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

На рис. 1 представлены концентрационные зависимости параметров решетки  $a$  при комнатной температуре, намагниченности насыщения  $\sigma$  при 77 К и магнитных моментов (на формульную единицу)  $\mu_f$ , рассчитанных из  $\sigma$ , в сплавах  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$ . Как видно на рисунках, замещение атома скандия (с внешними  $3d^1 4s^2$ -электронами) на атомы иттрия (с внешними  $4d^1 5s^2$ -электронами), т. е. без изменения числа внешних  $d$ - и  $s$ -электронов в системе, приводит к существенным изменениям параметров решетки  $a$  и магнитных моментов  $\mu_f$  рассматриваемых соединений.

На рис. 2 приведены спектры ЯМР на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в исследуемых сплавах при 4.2 К. Спектры сплавов  $\text{ScFe}_2$  и  $\text{YFe}_2$  полностью совпадают с аналогичными спектрами для данных сплавов, полученными в [17, 18]. Спектры ЯМР ядер  $^{57}\text{Fe}$  в этих соединениях состоят из двух пиков с отношением интенсивностей 1 : 3, как обычно наблюдается в сплавах Лавеса с кубической структурой на основе железа, и обусловлены тем, что имеются два магнитно-неэквивалентных состояния атомов железа в решетке  $\text{MgCu}_2$ , когда ось легкого намагничивания лежит в направлении оси  $\langle 111 \rangle$ . При низком содержании иттрия в  $\text{ScFe}_2$  или, наоборот, скандия в  $\text{YFe}_2$

спектры ЯМР ядер  $^{57}\text{Fe}$  узкие, однако в области составов с  $0.2 < x < 0.8$  спектры слегка расширяются. Заметим, что в первой координационной сфере атом железа окружен шестью атомами железа  $6\text{Fe}$ , а во второй — имеются шесть позиций, которые занимают атомы скандия и (или) иттрия, т. е.  $6(\text{Sc,Y})$ . Средние сверхтонкие поля на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ ,  $H(\text{Fe})$ , в системе  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$  приведены на рис. 3а. Они определялись из средних резонансных частот  $f_{av}$ , которые, в свою очередь, оценивались из центра тяжести спектров:

$$f_{av} = \int f P(f) df / \int P(f) df,$$

где  $P(f)$  — распределение резонансных частот  $f$ , представленных на рис. 2.

На рис. 2 также показаны спектры ЯМР, измеренные в диапазоне частот 20–32 МГц, сплавов  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$ . В этом диапазоне частот наблюдаются сигналы ЯМР как от ядер  $^{57}\text{Fe}$ , так и от примесных ядер  $^{27}\text{Al}$ , поэтому представленные на рисунке спектры обусловлены сигналами как от ядер  $^{57}\text{Fe}$ , так и от ядер  $^{27}\text{Al}$ . Спектры ЯМР в сплавах  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$  и  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$  снимались при одинаковых условиях возбуждения сигналов эха, а амплитуды эха измерялись в микровольтах с помощью калиброванного высокочастотного радиоимпульса в каждой точке спектра. Сравнение ЯМР-спектров  $^{57}\text{Fe}$  и совместных спектров от ядер  $^{27}\text{Al}$  и  $^{57}\text{Fe}$  показывает, что спектры ЯМР ядер  $^{27}\text{Al}$  много шире спектров ЯМР ядер  $^{57}\text{Fe}$ . Проведена нормировка амплитуд эха на один грамм вещества. Учитывая то, что условия возбуждения эха для измерения спектров ЯМР на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в сплавах  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$  и совместных спектров ЯМР на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  и  $^{27}\text{Al}$  в  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$  были одинаковыми и то, что в каждом случае измерялись абсолютные амплитуды эха, из общих спектров ЯМР на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  и  $^{27}\text{Al}$  сплава  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_{1.97}\text{Al}_{0.03}$  был вычтен спектр ЯМР ядер  $^{57}\text{Fe}$  сплава  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$  и, таким образом, были получены спектры ЯМР примесных ядер  $^{27}\text{Al}$  в исследуемых сплавах. Здесь было сделано предположение, что примесные атомы алюминия в количестве менее 1 ат. % не возмущают электронных и магнитных свойств сплавов, а также сверхтонких полей на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  в  $(\text{Sc,Y})\text{Fe}_2$ . На рис. 2 также приведены спектры ЯМР примесных ядер  $^{27}\text{Al}$ , а на рис. 3б представлена концентрационная зависимость средних сверхтонких полей,  $H(\text{Al})$ , на ядрах  $^{27}\text{Al}$  в исследованных соединениях Лавеса. Поля  $H(\text{Al})$  определялись из средних резонансных частот, оцененных по центрам тяжести спектров. Как видно, значе-

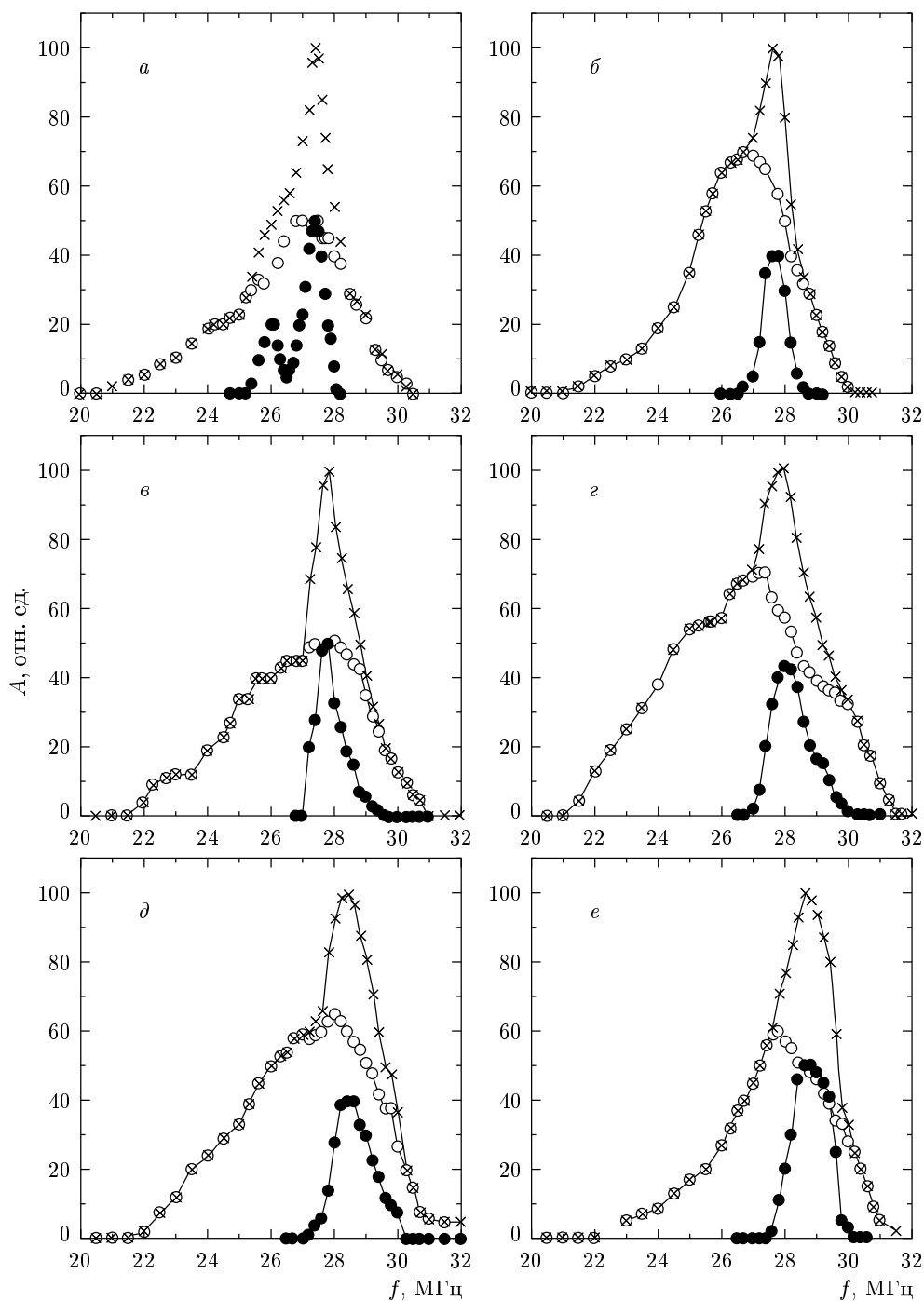


Рис. 2. Спектры ЯМР на ядрах  $^{57}Fe$  (•) в сплавах  $(Sc_{1-x}Y_x)Fe_2$ , ядрах  $^{57}Fe + ^{27}Al$  (x) и ядрах  $^{27}Al$  (o) в сплавах  $(Sc_{1-x}Y_x)Fe_{1.97}Al_{0.03}$  при 4.2 К:  $x = 0$  (a), 0.1 (б), 0.3 (в), 0.5 (г), 0.7 (д), 0.9 (е)

ния средних сверхтонких полей на примесных ядрах  $^{27}Al$ , атомы которых занимают места атомов железа в кубической решетке, увеличиваются при увеличении содержания иттрия в сплаве. Примесные атомы алюминия, занимая места атомов железа в

кубической решетке  $MgCu_2$ , имеют такое же окружение, как и сами атомы железа, т. е. 6Fe в первой координационной сфере и 6(Sc, Y) во второй. Кривая  $H(Al)$  показывает концентрационную зависимость сверхтонких полей, наводимых магнитными момен-

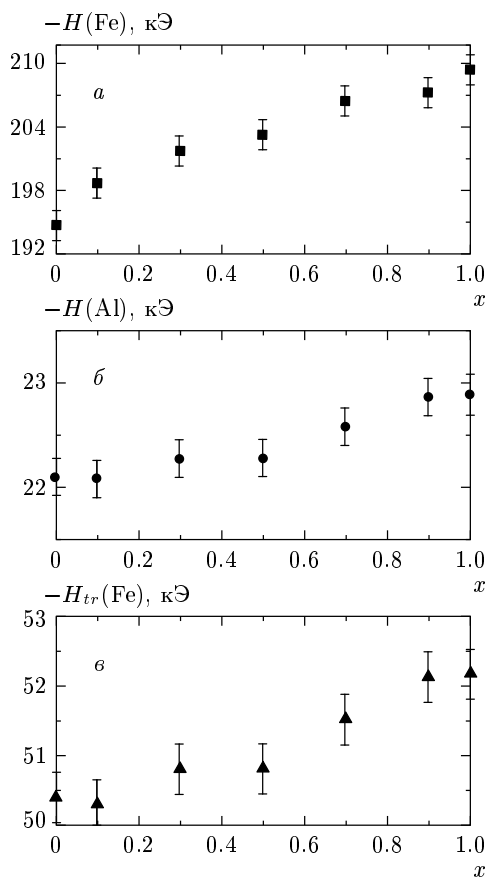


Рис. 3. Концентрационные зависимости а) сверхтонких полей на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ ; б)  $^{27}\text{Al}$ ; в) — наведенного вклада  $H_{tr}(\text{Fe})$ , рассчитанного по формуле (3), в сплавах  $(\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x)\text{Fe}_2$

тами атомов в ближайших координационных сферах в узле, занимаемом атомом железа или алюминия.

На рис. 4а приведены спектры ЯМР ядер  $^{89}\text{Y}$ , а на рис. 4б — спектры ЯМР ядер  $^{45}\text{Sc}$  в соединениях  $(\text{Sc},\text{Y})\text{Fe}_2$  при 4.2 К. Как видно, спектры рассматриваемых ядер узкие для малого содержания иттрия в  $\text{ScFe}_2$  или малых добавок скандия в  $\text{YFe}_2$ . Спектры ЯМР на ядрах  $^{45}\text{Sc}$  и ядрах  $^{89}\text{Y}$  в области составов с  $0.2 < x < 0.8$  становятся широкими. На рис. 5 приведены концентрационные зависимости средних сверхтонких полей на ядрах  $^{45}\text{Sc}$ ,  $H(\text{Sc})$ , и  $^{89}\text{Y}$ ,  $H(\text{Y})$ , в сплавах  $(\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x)\text{Fe}_2$ . Эти поля также определялись из средних значений резонансных частот. Предполагается, что знак сверхтонких полей на рассматриваемых ядрах отрицательный в соответствии со знаком сверхтонкого поля на ядрах  $^{45}\text{Sc}$  в  $\text{ScFe}_2$  [17] и ядрах  $^{89}\text{Y}$  в  $\text{YFe}_2$  [18]. Как следует из результатов настоящей работы, при замещении атомов скандия на атомы иттрия в сплавах  $(\text{Sc},\text{Y})\text{Fe}_2$

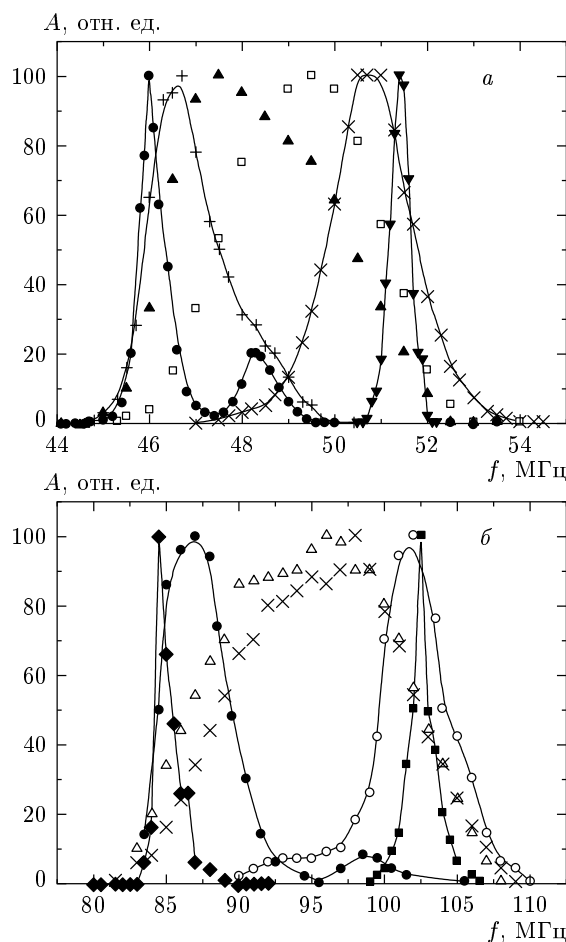


Рис. 4. Спектры ЯМР а) на ядрах  $^{89}\text{Y}$ :  $x = 0.1$  ( $\blacktriangledown$ ),  $0.3$  ( $\times$ ),  $0.5$  ( $\square$ ),  $0.7$  ( $\blacktriangle$ ),  $0.9$  ( $+$ ),  $0.98$  ( $\bullet$ ); б) на ядрах  $^{45}\text{Sc}$ :  $0.1$  ( $\blacksquare$ ),  $0.2$  ( $\circ$ ),  $0.7$  ( $\triangle$ ),  $0.5$  ( $\times$ ),  $0.9$  ( $\bullet$ ),  $0.95$  ( $\blacklozenge$ ) в сплавах  $(\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x)\text{Fe}_2$

абсолютные значения сверхтонких полей на ядрах  $^{45}\text{Sc}$  и  $^{89}\text{Y}$  уменьшаются, в то время как на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  и примесных ядрах  $^{27}\text{Al}$ , атомы которых занимают места атомов железа, они увеличиваются. Заметим, что атомы скандия или иттрия в кубической решетке сплава  $\text{RFe}_2$  содержат 12Fe в первой координационной сфере и 4R ( $\text{R} = \text{Sc},\text{Y}$ ) во второй.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сверхтонкие поля на ядрах магнитных атомов, например, на ядрах  $^{57}\text{Fe}$  атомов железа, состоят из трех главных вкладов (см., например, [19]):

$$H(\text{Fe}) = H_{cp}(\text{Fe}) + H_s(\text{Fe}) + H_{tr}(\text{Fe}), \quad (1)$$

где  $H_{cp}(\text{Fe})$  — вклад в сверхтонкое поле от поляризации  $s$ -электронов внутренних оболочек атома

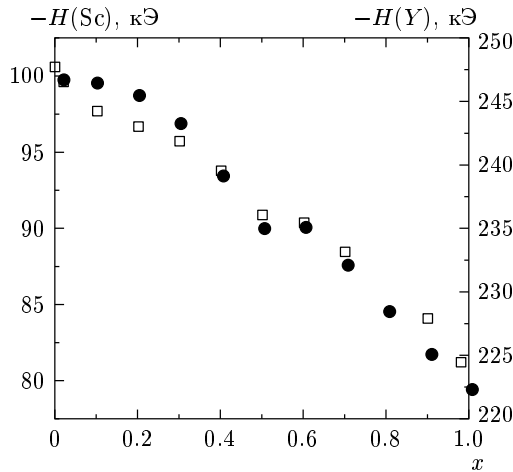


Рис. 5. Концентрационные зависимости величин сверхтонких полей на ядрах  $^{89}\text{Y}$  (●) и  $^{45}\text{Sc}$  (□) в сплавах  $(\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x)\text{Fe}_2$

железа магнитным моментом атома железа  $\mu(\text{Fe})$ ,  $H_s(\text{Fe})$  — вклад в сверхтонкое поле от поляризации внешних  $s$ -электронов магнитным моментом атома железа  $\mu_B(\text{Fe})$ ,  $H_{tr}(\text{Fe})$  — вклад в сверхтонкое поле от поляризации электронов проводимости магнитными моментами атомов в ближайших координационных сферах;  $H_{tr}(\text{Fe}) = \sum a_i \mu_i N_i$ , где  $i$  — номер координационной сферы,  $\mu_i$  — средний магнитный момент магнитных атомов в  $i$ -й сфере, а  $N_i$  — число магнитных атомов в  $i$ -й сфере (подробнее см., например, [14]). Первый и второй вклады в сверхтонкое поле происходят от атома железа, на ядре которого мы наблюдаем ЯМР, и они пропорциональны магнитному моменту самого атома железа  $\mu(\text{Fe})$ , т. е.

$$H_{cp}(\text{Fe}) = P_1(\text{Fe})\mu(\text{Fe}), \quad H_s(\text{Fe}) = P_2(\text{Fe})\mu(\text{Fe}),$$

$$H_{cp}(\text{Fe}) + H_s(\text{Fe}) = P(\text{Fe})\mu(\text{Fe}) = H_{loc}(\text{Fe}).$$

Сверхтонкое поле на ядре магнитного атома обычно представляется в виде суммы двух вкладов:

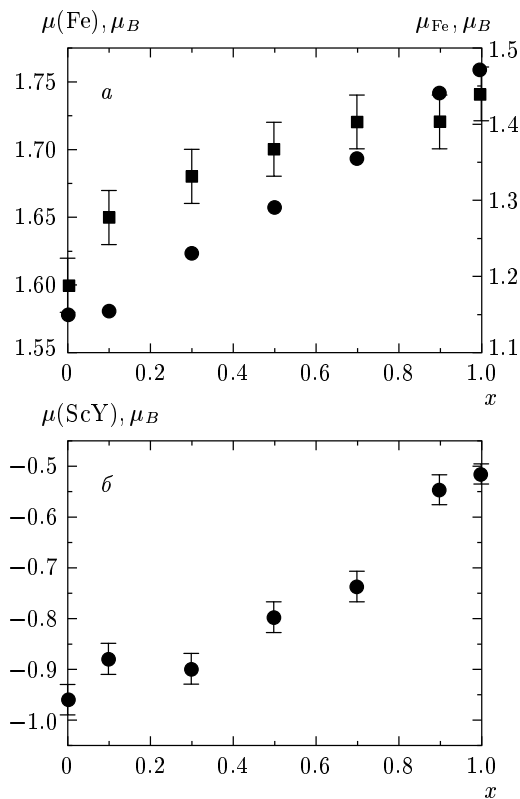
$$H(\text{Fe}) = H_{loc}(\text{Fe}) + H_{tr}(\text{Fe}), \quad (2)$$

где  $H_{loc}(\text{Fe})$  — так называемый локальный вклад в сверхтонкое поле,  $P(\text{Fe})$  — поле на ядре  $^{57}\text{Fe}$ , отнесенное к одному магнетону Бора;  $P(\text{Fe})$  — константы и для некоторых  $d$ -элементов их значения оценены в работе [19]. Обычно в формуле (1) содержатся еще два малых вклада, один связан с дипольными эффектами  $H_{dip}$ , а второй — с полем Лоренца  $H_{Lor}$ . В кубических сплавах поле  $H_{dip}$  мало. В данной работе вклад поля  $H_{Lor}$  учитывался. Это поле

рассчитывалось с помощью данных по намагниченности  $\sigma$  (рис. 1) и плотности сплавов, оцененных по параметру решеток  $a$  (рис. 1). Поле  $H_{Lor}$  изменяется от 2.1 до 2.3 кЭ при увеличении содержания иттрия в сплавах от  $x = 0$  до  $x = 1$ . Для определения эффекта гибридизации  $d$ -зон железа с  $d$ -зонами скандия или иттрия в рассматриваемых сплавах Лавеса нам надо оценить магнитные моменты на атомах железа  $\mu(\text{Fe})$ , скандия  $\mu(\text{Sc})$  и иттрия  $\mu(\text{Y})$  из данных по сверхтонким полям и сравнить их с теми  $\mu(\text{Fe})$ , которые могли бы быть на атомах железа, если бы эффект гибридизации отсутствовал (т. е. когда  $\mu(\text{Sc})$  и  $\mu(\text{Y})$  равны нулю). Как следует из формулы (2), мы можем оценить локальный магнитный момент на атомах железа из данных по экспериментальным значениям сверхтонкого поля на ядре  $^{57}\text{Fe}$ , если нам удастся оценить локальный вклад на ядрах  $^{57}\text{Fe}$ ,  $H_{loc}(\text{Fe})$ , в экспериментальное сверхтонкое поле  $H(\text{Fe})$  в формуле (2). В настоящий момент это сделать практически невозможно и обычно исследователи пытаются оценить второй главный вклад,  $H_{tr}(\text{Fe})$ , в сверхтонкое поле на ядре магнитного атома. Имеются два способа оценки  $H_{tr}(\text{Fe})$  [14, 20]. Способ, изложенный в [20], требует знания значений сверхтонких полей на примесных ядрах  $3d$ -атомов, замещающих атомы железа, в каждом исследованном сплаве. Второй способ подробно изложен в работе [14]. В ней показано, что в сплавах на основе железа для оценки  $H_{tr}(\text{Fe})$  достаточно использовать сверхтонкие поля на примесных ядрах немагнитных атомов алюминия или меди, если атомы алюминия или меди занимают места атомов железа в сплавах на основе железа, в том числе и в соединениях Лавеса. В настоящей работе были измерены сверхтонкие поля на примесных ядрах  $^{27}\text{Al}$ . Согласно [14] вклад  $H_{tr}(\text{Fe})$  можно оценить из данных по сверхтонким полям на примесных ядрах  $^{27}\text{Al}$ ,  $H(\text{Al})$ , из соотношения

$$H_{tr}(\text{Fe}) = H(\text{Al})A_s(\text{Fe})/A_s(\text{Al}), \quad (3)$$

где  $A_s(\text{Fe})$ ,  $A_s(\text{Al})$  — константы сверхтонкого взаимодействия для атомов железа и алюминия [21]:  $A_s(\text{Fe}) = 1780$  кЭ на один  $s$ -электрон,  $A_s(\text{Al}) = 789$  кЭ на один  $s$ -электрон. С помощью экспериментальных значений сверхтонких полей на ядрах  $^{27}\text{Al}$ ,  $H(\text{Al})$ , и формулы (3) были оценены наведенные вклады  $H_{tr}(\text{Fe})$ , а затем по формуле (2) и локальные вклады  $H_{loc}(\text{Fe})$ . С учетом того, что  $P(\text{Fe}) = -90$  кЭ/ $\mu_B$  [19], были определены локальные магнитные моменты на атомах железа  $\mu(\text{Fe})$  в сплавах  $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$ , и значения этих моментов приведены на рис. 6а. Как видно на рисунке,



**Рис. 6.** Концентрационные зависимости *а*) средних магнитных моментов на атомах железа  $\mu_{Fe}$ , рассчитанных по формуле  $\mu_f = 2\mu_{Fe}$  в предположении, что атомы Sc и Y не имеют магнитных моментов ( $\bullet$ ); магнитных моментов на атомах железа  $\mu(Fe)$ , оцененных из локального вклада  $H_{loc}(Fe)$  ( $\blacksquare$ ); *б*) средних магнитных моментов  $\mu(Sc,Y)$  в узлах решетки, занимаемых атомами скандия и иттрия, в сплавах  $(Sc_{1-x}Y_x)Fe_2$

при замещении скандия на иттрий в соединениях  $Sc_{1-x}Y_xFe_2$  магнитные моменты на атомах железа  $\mu(Fe)$  увеличиваются от  $1.60\mu_B$  до  $1.74\mu_B$ . Если предположить, что магнитными атомами в сплавах  $(Sc,Y)Fe_2$  являются только атомы железа (т.е. отсутствует эффект гибридизации и магнитные моменты на атомах скандия и иттрия равны нулю), то  $\mu_f = 2\mu_{Fe}$  и магнитные моменты на атомах железа  $\mu_{Fe}$  в рассматриваемой системе сплавов изменялись бы от  $1.11\mu_B$  ( $x = 0$ ) до  $1.48\mu_B$  ( $x = 1$ ) (см. рис. 6а). Как видно, реальные значения  $\mu(Fe)$  существенно отличаются от  $\mu_{Fe}$ , которые были бы на атомах железа в отсутствие эффекта гибридизации.

Из экспериментальных данных, полученных в этой работе, следует, что магнитный момент на формульную единицу,  $\mu_f$ , абсолютные значения сверхтонких полей на ядрах  $^{57}Fe$  и примесных ядрах  $^{27}Al$ ,

атомы которых занимают места атомов железа в решетке  $MgSc_2$ , увеличиваются при замещении скандия на иттрий. Поэтому рост величины сверхтонкого поля на ядрах  $^{57}Fe$  и  $^{27}Al$  можно было объяснить ростом магнитных моментов на атомах железа и без эффекта гибридизации. Если предположить, что атомы скандия и иттрия не имеют магнитных моментов, то в этом случае сверхтонкие поля на ядрах  $^{45}Sc$  и  $^{89}Y$  также должны были бы увеличиваться, так как эти атомы имеют в ближайших координационных сферах только магнитные атомы железа и сверхтонкие поля на ядрах  $^{45}Sc$  и  $^{89}Y$  определялись бы только вкладом  $H_{tr}$ , который пропорционален величине магнитных моментов атомов железа в ближайших координационных сферах. Однако, как показывают наши исследования, абсолютные значения сверхтонкого поля на ядрах  $^{45}Sc$  и  $^{89}Y$  сильно уменьшаются при замене скандия на иттрий при росте магнитных моментов на атомах железа. Эти данные показывают, что атомы скандия и иттрия должны иметь магнитные моменты и, следовательно, сверхтонкие поля на ядрах  $^{45}Sc$  и  $^{89}Y$  должны еще, кроме наведенных полей  $H_{tr}$ , содержать значительные локальные поля  $H_{loc}(Sc)$  и  $H_{loc}(Y)$  от собственных магнитных моментов  $\mu(Sc)$  и  $\mu(Y)$ .

В настоящее время отсутствуют также систематические данные о сверхтонких полях на различных примесных ядрах *s*- и *p*-атомов, занимающих места атомов R в сплавах Лавеса  $RFe_2$ . Это не позволяет оценить главные вклады в сверхтонкое поле на ядрах атомов R в этой (или других) системе сплавов редкоземельного элемента с железом. Однако в данной работе мы можем оценить  $\mu(Sc)$  и  $\mu(Y)$  из данных по измеренным магнитным моментам  $\mu_f$  и локальным магнитным моментам на атомах железа  $\mu(Fe)$ , оцененным выше (рис. 6а), полагая, что в сплавах Лавеса  $RFe_2$  величина  $\mu_f = 2\mu(Fe) + \mu(R)$ . Рассчитанные таким образом значения магнитных моментов в узлах решетки, занимаемых атомами скандия и (или) иттрия,  $\mu(Sc,Y)$ , приведены на рис. 6б. Как видно, магнитные моменты  $\mu(Sc,Y)$  отрицательные, т.е. направлены противоположно магнитным моментам железа. При увеличении содержания иттрия в сплаве значение  $\mu(Sc,Y)$  по абсолютной величине уменьшается примерно от  $1\mu_B$  до  $0.5\mu_B$ .

Итак, результаты этой работы показали, что в соединениях  $Sc_{1-x}Y_xFe_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) существует гибридизация *d*-зон железа с *d*-зонами скандия или *d*-зонами иттрия. Этот эффект приводит к формированию значительных магнитных моментов на атомах скандия и иттрия (причем эти моменты направлены противоположно магнитным моментам атомов

железа) и образованию ферромагнитной структуры в этих сплавах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Sh. Ishida and S. Asano, J. Phys. Soc. Jap. **54**, 4688 (1985).
2. P. Mohn and K. Schwarz, Physica B + C **130**, 26 (1985).
3. H. Yamada and M. Shimizu, J. Phys. F: Met. Phys. **16**, 1039 (1986).
4. S. Asano and Sh. Ishida, J. Magn. Magn. Mat. **70**, 187 (1987).
5. K. Terao and M. Shimizu, Phys. Stat. Sol. (b) **139**, 485 (1987).
6. M. S. S. Brooks, O. Eriksson, and B. Johansson, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 5861 (1989).
7. M. S. S. Brooks, L. Nordstrom, and B. Johansson, J. Appl. Phys. **69**, 5683 (1991).
8. C. Ritter, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 2765 (1989).
9. S. J. Kennedy, P. J. Brown, and B. R. Coles, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 5169 (1993).
10. D. Givord, A. R. Gregory, and J. Schweizer, J. Magn. Magn. Mat. **15-18**, 293 (1980).
11. P. Warren, J. B. Forsyth, G. J. McInture, and N. Bernhoeft, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 5795 (1992).
12. В. С. Покатилов, Металлофизика **11**, 51 (1989).
13. В. С. Покатилов, ЖЭТФ **66**, 531 (1987).
14. V. S. Pokatilov, J. Magn. Magn. Mat. **189**, 189 (1998).
15. В. С. Покатилов, В. В. Голикова, Е. Ф. Сидохин, ЖЭТФ **68**, 1202 (1989).
16. *Справочник, Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа*, Металлургия, Москва (1986), с. 81.
17. В. С. Покатилов, В. В. Садчиков, Е. Ф. Сидохин, О. В. Утенкова, ФММ **62**, 69 (1986).
18. A. Oppelt and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. B **13**, 4998 (1976).
19. M. B. Stearns, Phys. Rev. B **4**, 4081 (1971).
20. J. Boysen, A. Heidari, and A. Brewer, J. Magn. Magn. Mat. **59**, 15 (1986).
21. I. A. Campbell, J. Phys. C **2**, 1338 (1969).