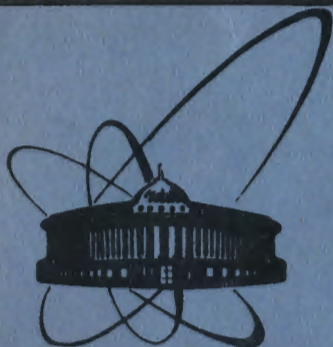


2/IV 84



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

1623/84

P14-83-902

Е.А.Горемычкин, Э.Мюле

ВКЛАД ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ  
ВО ВНУТРИКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ  
В ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ  
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Направлено в журнал "Письма в ЖЭТФ"

1983

Экспериментальные исследования кристаллического электрического поля /КЭП/, выполненные в течение последнего десятилетия с помощью неупругого рассеяния тепловых нейтронов /НРТН/ на соединениях с кубической точечной симметрией иона редкоземельного металла /РЗМ/, дали противоречивые результаты относительно роли электронов проводимости в формировании КЭП /1,2/.

Наряду с этим была доказана неадекватность модели эффективных точечных зарядов для металлических систем. В силу того, что КЭП в значительной мере определяет свойства соединений РЗМ, вопрос о природе КЭП в металлах является одной из центральных проблем, возникающих при изучении этих соединений.

При интерпретации свойств соединений РЗМ используется феноменологическая модель КЭП с гамильтонианом вида /3/:

$$H = \sum_{\ell \leq 6} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} A_{\ell}^m \langle r^{\ell} \rangle \sigma_{\ell} O_{\ell}^m (J_{+}, J_{-}, J_z, J), \quad /1/$$

где  $O_{\ell}^m$  - эквивалентные операторы Стивенсона;  $A_{\ell}^m$  - эмпирические параметры КЭП, определяемые из экспериментов по НРТН;  $\langle r^{\ell} \rangle$  - радиальные интегралы /4/;  $\sigma_{\ell}$  - множитель Стивенсона.

Нами были проведены измерения НРТН на образцах с гексагональной точечной симметрией иона РЗМ  $RNi_5$ , где  $R = Tb, Ho, Er$  /структура типа  $CaCu_5$  /, на времяпролетном спектрометре в обратной геометрии с бериллиевым фильтром перед детектором на реакторе ИБР-30 Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ. С помощью разработанной методики /5/ на основе спектров НРТН определены величины четырех параметров гамильтониана гексагонального КЭП, которые приведены в табл.1. Параметры  $A_{\ell}^m$  не зависят от типа редкоземельного иона и определяются только КЭП, которое создается окружением иона РЗМ в кристалле. Неожиданным в величинах параметров  $A_{\ell}^m$  является то, что в изоструктурных соединениях с близкими значениями параметров решетки они значительно различаются и не показывают какого-либо закономерного изменения, за исключением знака.

В /6/ определены на основе измерения дифференциальных возмущенных угловых  $y-y$  корреляций для группы соединений  $RNi_5$  ( $R = Pr, Nd, Tb, Dy, Er$ ) градиенты КЭП на месте ядра редкоземельного иона. Параметр  $A_2^0$ , определенный в экспериментах с нейтронами, имеет смысл усредненного по радиальной части волновой функции градиента КЭП на месте  $4f$ -электронной оболочки иона РЗМ. Градиент КЭП  $V_{zz}$  и параметр  $A_2^0$  связаны соотношением

$$V_{zz} = -4A_2^0 / e.$$

Таблица 1

Соединение	$A_2^0$	$A_4^0$	$A_6^0$	$A_6^6$
$HoNi_5$	-215,80	-16,66	5,24	150,56
$TbNi_5$	-137,63	-9,84	5,93	189,64
$ErNi_5$	-108,75	-44,32	9,13	52,07

Ошибка для параметра  $A_2^0$  ~ 3%, для  $A_4^0$ ,  $A_6^0$ ,  $A_6^6$  ~ 10%. Раз-  
мерность  $A_2^0$ : мэВ·Å<sup>-1</sup>.

Таблица 2

Соединение	$A_2^0$	$A_2^{0*}$	$A_2^0 - A_2^{0*}$
$PrNi_5^*$	-67,59	453,72	521,31
$NdNi_5^{**}$	-143,96	447,74	591,70
$TbNi_5$	-137,63	436,33	573,96
$DyNi_5^{**}$	-142,67	440,90	583,57
$ErNi_5$	-108,75	438,62	547,37

\* Данные /10/.

\*\* Данные /7/.

Недавно в /8/ на примере большого числа непроводящих соеди-  
нений  $RF_3$  было показано, что градиенты КЭП на ядре иона РЗМ  
и его 4f-оболочке одинаковы. В первом столбце табл.2 приведе-  
ны значения  $A_2^0$  для металлических систем, определенные с по-  
мощью НРТН и измерений магнитных свойств на монокристаллах /7/  
или, другими словами, по реакции 4f-электронной оболочки на  
КЭП. Во втором столбце даны величины:  $A_2^{0*}$ , которые соглас-  
но /2/ были пересчитаны на основе значений градиента КЭП  $V_{zz}$   
на месте ядра иона РЗМ /6/. При сравнении значений  $A_2^0$  и  $A_2^{0*}$ , при-  
веденных в табл.2, видно, что между градиентами КЭП на месте  
ядра и на 4f-электронной оболочке имеется большая разница. Их  
отношение в случае  $PrNi_5$  составляет ~6, для других соединений  
типа  $RNi_5$  это отношение ~3.

Хорошее совпадение величин градиентов КЭП на ядре и 4f-обо-  
лочке в случае изоляторов и их большая разница в случае металли-  
ческих соединений, на наш взгляд, связаны со значительным влия-  
нием электронов проводимости на КЭП в металлах. Согласно пред-  
ложению, выдвинутому в /9/, полную величину  $A_2^0$  можно представить  
в виде суммы трех членов:

$$A_2^0 = (A_2^0)_1 + (A_2^0)_2 + (A_2^0)_3,$$

/3/

где  $(A_2^0)_1$  - вклад в КЭП от ионных остовов /лигандов/,  $(A_2^0)_2$  -  
прямой кулоновский вклад электронов проводимости,  $(A_2^0)_3$  - об-  
менный вклад электронов проводимости, 4f-электронная оболочка  
испытывает воздействие всех трех компонент КЭП, в то время как  
ядро - только первых двух, и, следовательно, разницу между  $A_2^0$   
и  $A_2^{0*}$  можно отнести за счет обменного вклада электронов про-  
водимости /третий столбец табл.2/.

Наиболее существенным итогом данной работы является следую-  
щее: в металлических соединениях электроны проводимости дают  
значительный вклад в градиент КЭП, а использование измерений  
электростатической части сверхтонкого взаимодействия и НРТН  
дает возможность экспериментально выделить обменный вклад элект-  
ронов проводимости в градиент КЭП.

Авторы благодарны Ю.М.Останевицу за ценные обсуждения и за-  
мечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Андреефф А. и др. ЭЧАЯ, 1981, т.12, с.277.
2. Schmitt D. J.Phys.F., 1979, vol.9, p.1745.
3. Hutchings M.T. Solid State Phys., 1966, vol.16, p.227.
4. Freeman A.J., Desclaux J.F. JMMM, 1979, vol.12, p.11.
5. Горемычкин Е.А., Мюле Э. ОИЯИ, РЗ-83-172, Дубна, 1983;  
Мюле Э. ОИЯИ, РЗ-83-133, Дубна, 1983.
6. Devare S.H. et al. Hyperfine Interactions, 1981, vol.10,  
p.949.
7. Nait-Saada A. These. Institut National Polytechnique, de  
Grenoble, 1980.
8. Budzynski M. et al. JINR, E14-83-605, Dubna, 1983.
9. Devine R.A.B., Berthier Y. In: Crystalline Electric Field  
Effects in f-Electron Magnetism (Ed. by R.P.Guertin,  
W.Suski, Z.Zolnierok). Plenum Press, New York and London,  
1982, p.461.
10. Alekseev P.A. et al. phys.stat.sol.(b), 1980, vol.97, p.87.

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 декабря 1983 года.



## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D2,4-83-179	Труды XV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Дубна, 1982.	4 р. 80 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Горемычкин Е.А., Мюле Э. P14-83-902  
Вклад электронов проводимости  
во внутрикристаллический потенциал  
в интерметаллических соединениях редкоземельных металлов

Приводятся результаты измерения параметров кристаллического электрического поля /КЭП/ в интерметаллических соединениях  $RNi_5$  /R = Tb, Ho, Er / с помощью неупругого рассеяния тепловых нейтронов. Разница в величинах параметров  $A_2^0$ , определенных методами нейтронной спектроскопии и  $\gamma$ - $\gamma$  возмущенных угловых корреляций, интерпретируется как обменный вклад электронов проводимости в КЭП.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Goremychkin E.A., Mühle E. P14-83-902  
Contribution to the Crystalline Electric Field  
from Conduction Electrons in the Intermetallic  
Rare-Earth Compounds

Inelastic scattering of thermal neutrons is used to determine the parameters of crystalline electric field (CEF) in the intermetallic compounds  $RNi_5$  (R = Tb, Ho, Er). The difference of the quantities  $A_2^0$  obtained by neutron scattering and by the method of time differential perturbation of angular correlation is interpreted as exchange contribution to the CEF from conduction electrons.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой