

Объединенный институт ядерных исследований дубна

P14-84-632

1984

Е.А.Горемычкин, Э.Мюле, И.Натканец, М.Попеску, О.Д.Чистяков*

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В СОЕДИНЕНИИ NdNi₅ С ПОМОЩЬЮ НЕУПРУГОГО МАГНИТНОГО РАССЕЯНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

Направлено в журнал "Физика твердого тела"

* Институт металлургии им. А.А.Байкова АН СССР, Москва

ВВЕДЕНИЕ

Окружение иона редкоземельного металла /РЗМ/ в кристалле создает кристаллическое электрическое поле /КЭП/, взаимодействие с которым расщепляет основной мультиплет 4f - электронной оболочки и приводит к возникновению системы уровней /так называемые уровни КЭП/, энергия и волновые функции которых обуславливают целый ряд свойств веществ, содержащих ионы РЗМ ^{/1/}. Из большого числа возможных способов изучения КЭП в металлах выделенным является метод неупругого магнитного рассеяния тепловых нейтронов /НМРТН/. Являясь прямым спектроскопическим методом, НМРТН дает наиболее надежную информацию о КЭП, так как положение пиков в спектрах НМРТН соответствует разности энергий уровней, между которыми происходит переход, а их интенсивность зависит от коэффициентов смешивания волновых функций уровней.

В данной работе с помощью НМРТН проведено исследование интерметаллического соединения $NdNi_5$ с гексагональной точечной симметрией иона Nd^{+3} . На основе определенных в экспериментах по рассеянию нейтронов значений параметров гамильтониана КЭП рассчитаны полевая зависимость намагниченности ниже точки Кюри, обратная магнитная восприимчивость, магнитный вклад в удельную теплоемкость, и проведено их сравнение с экспериментом /2,3/. Результаты сравнения полученных значений параметров КЭП NdNi₅ с характеристиками КЭП в других соединениях RNi_5 /4,5,6,7/ обсуждаются с точки зрения влияния электронов проводимости на внутрикристаллический потенциал.

1. ГАМИЛЬТОНИАН КЭП. СЕЧЕНИЕ НМРТН

Для описания кристаллического электрического поля используется феноменологическая модель, гамильтониан которой, в случае гексагональной точечной симметрии иона РЗМ в кристалле, с помощью эквивалентных операторов Стивенса можно представить в виде^{/8/}:

$$H_{K^{3}\Pi} = B_{2}^{0}O_{2}^{0} + B_{4}^{0}O_{4}^{0} + B_{6}^{0}O_{6}^{0} + B_{6}^{6}O_{6}^{6}, \qquad /1/$$

где B_{ℓ}^{m} - параметры КЭП, определяемые из спектров НМРТН, O_{ℓ}^{m} - эквивалентные операторы Стивенса, конкретный вид которых можно найти в таблицах работы^{/9/}. При проведении вычислений с га-мильтонианом /1/ его удобнее параметризовать следующим образом^{/10/}:

$$H_{K3\Pi} = W\{(1 - |y|)\frac{O_2^0}{F_{20}} + y[x\frac{O_4^0}{F_{40}} + (1 - |x|)((1 - |z|)\frac{O_6^0}{F_{60}} + z\frac{O_6^0}{F_{66}})]\}, /2/$$

где безразмерные параметры x, y, z меняются в ограниченном интервале от -1 до +1 и связаны с B_ℓ^m следующими соотношениями: $B_2^0 F_{20} = W \cdot (1 - |y|);$; $B_4^0 F_{40} = W \cdot y \cdot x$, $B_6^0 F_{60} = W \cdot y \cdot (1 - |x|) \cdot (1 - |z|);$ $B^0 F = W \cdot y \cdot z \cdot (1 - |x|)$. $F_{\ell m}$ - наименьший общий множитель матрицы соответствующего оператора Стивенса $O_\ell^m / 9 / Удобство такой пара$ метризации при практических расчетах с гамильтонианом /2/ состоит в том, что три параметра КЭП x, y, z имеют ограниченнуюобласть вариации, а четвертый параметр W, определяющий масштабрасщепления, может быть ограничен, исходя из физических соображений, если принять, например, что полное расщепление не более50 мэВ.

Дважды дифференциальное сечение НМРТН в дипольном приближении /малых передач импульса/ и предположении малой ширины перехода имеет вид /11/:

$$\frac{\mathrm{d}^{2}\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\epsilon} = \mathrm{N}\left(\frac{1.91\mathrm{e}}{2\mathrm{m}_{\mathrm{e}}\mathrm{c}^{2}}\mathrm{g}_{\mathrm{J}}\right)^{2}\frac{\mathrm{k}'}{\mathrm{k}}\mathrm{f}^{2}(\kappa)\sum_{n_{\mathrm{m}}}\rho_{\mathrm{n}}(\mathrm{T})|<\Gamma_{\mathrm{n}}|\mathrm{J}_{\mathrm{L}}|\Gamma_{\mathrm{m}}>|^{2}\delta(\mathrm{E}_{\mathrm{n}}-\mathrm{E}_{\mathrm{m}}-\epsilon), \qquad /3/$$

где N - число рассеивающих центров, \mathbf{g}_{J} - фактор Ланде, \vec{k}' и \vec{k} волновые векторы рассеянных и падающих нейтронов соответственно, $\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$ - вектор рассеяния, $\mathbf{f}(k)$ - магнитный формфактор, $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{T})$ - заселенность уровня, с которого осуществляется переход, $<\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{n}} | \mathbf{J}_{\perp} | \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{m}} >$ - матричный элемент компоненты оператора полного углового момента, перпендикулярного вектору рассеяния \vec{k} , квадрат которого описывает относительную вероятность перехода между уровнями с энергией $\mathbf{E}_{\mathbf{n}}$ и $\mathbf{E}_{\mathbf{m}}$. В данной работе предполагалось, что форма линий в спектре описывается гауссианом с одинаковой для всех переходов шириной $\gamma_{\mathbf{nm}}$, и ее определение производилось из сравнения рассчитанных и экспериментальных спектров для каждой температуры независимо. Основной мультиплет ${}^{4}\mathbf{I}_{9/2}$ иона Nd⁺³ в КЭП гексагональной

Основной мультиплет ${}^{4}I_{9/2}$ иона Nd ${}^{+3}$ в K3П гексагональной симметрии расщепляется на пять дублетов /ион Крамерса/: Γ_7 , $\Gamma_8^{(1)}$, $\Gamma_8^{(2)}$, $\Gamma_9^{(1)}$, $\Gamma_9^{(2)}$; между которыми возможны восемь неупругих переходов. С целью определения природы особенностей в спектрах неупругого рассеяния /магнитная или фононная/ проводились эксперименты с изоструктурным соединением LaNi₅, где отсутствует магнитный вклад в рассеяние,

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ИХ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

Поликристаллические образцы NdNi₅ и LaNi₅ были приготовлены методом дуговой плавки на медном водоохлажденном поду из неодима, лантана чистотой 99,9% и никеля 99,99%. Нейтрон-дифракцион-



ные измерения по методу времени пролета и дифракция рентгеновских лучей показали отсутствие других фаз системы Nd-Ni и La-Ni. Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов проводились на спектрометре по времени пролета в обратной геометрии с бериллиевым фильтром и пиролитическим графитом /кристаллмонохроматор/ перед детектором на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2/12/. Измерения проводились на четырех углах рассеяния одновременно /30°, 50°, 70° и 90°/ при температурах образца 12К и 77К. На рис.1 приведены экспериментальные спектры /точки/ LaNis при T = 77K, NdNis при T = 12K и 77K, просуммированные по четырем углам рассеяния. В спектрах от NdNi, на рис.1 видны три хорошо определенных пика магнитного происхождения при передачах энергии $\epsilon_1 = /1, 4+0, 2/$ мэВ, $\epsilon_2 = /2, 9+0, 2/$ мэВ и с=/14,0+0,2/ мэВ. Это следует из сравнения со спектром LaNis на рис.1. Температурная зависимость интенсивности рассеяния позволяет соотнести пики при ст и са переходам с основного, а при є, - с возбужденного уровней. Определение параметров КЭП, содержащихся в гамильтониане /2/, проводилось прямой подгонкой рассчитанных спектров /2/, /3/ и учетом функции разрешения спектрометра для обеих температур одновременно при помощи про-. граммы МНК FUMILT /13/ на ЭВМ PDP-11/70. В качестве начальных параметров МНК-процедуры использовались значения x, y, z, W, определенные с помощью разработанной нами методики /14,15/. При обработке учитывались результаты магнитных измерений, согласно которым NdNi 5 ниже T = 8 K - ферромагнетик с анизотропией типа "легкая плоскость^{61/2/}, т.е. $B_2^0 > 0$. Фононный спектр при малых передачах энергии аппроксимировался распределением Дебая.



Рис.1. Спектры неупругого рассеяния нейтронов для LaNi 5, T = .77 K, и NdNi 5 T = 12 K, 77 K /точки/. Штрихованная линия – вклад в рассеяние переходов между уровнями КЭП, сплошная линия – теоретический спектр с учетом магнитного и ядерного рассеяния. ϵ – передача энергии в мэВ, N – номер канала шириной 128 мкс, I – число отсчетов в канале.



Рис.2. Схема уровней расщепленного в КЭП основного ${}^{4}I_{9/2}$ мультиплета иона Nd⁺³ в соединении NdNi₅. Е - энергия уровней в мэВ, Γ - теоретико-групповое обозначение уровней, $\Sigma a_{m_J} | m_J >$ волновые функции уровней.

Слабая особенность в спектре LaNi₅ в области передач энергий ~ 1 мэВ обусловлена аппаратными эффектами /неполным подавлением бериллиевой предграницы монохроматором из пирографита/.

В качестве наилучшего набора параметров КЭП для соединения NdNi₅ были определены следующие значения: x = -/0,07+0,02/, y = -/0,33+0,02/, z = 0,72+0,05, W = /1,94+0,02/ мэВ или $B_2^0 = 0,22$ мэВ, $B_4^0 = 0,54\cdot10^{-3}$ мэВ, $B_6^0 = -0,33\cdot10^{-4}$ мэВ, $B_6^6 = -0,12\cdot10^{-2}$ мэВ.

На рис.1 пунктирной линией показан вклад магнитного рассеяния на переходах между уровнями КЭП, рассчитанный с найденным набором значений параметров КЭП, сплошная линия на рис.1 расчетный спектр с учетом магнитного и фононного рассеяния. На рис.2 представлена схема уровней основного мультиплета 1_{9/2} иона Nd⁺³ в NdNi₅, полученная диагонализацией гамильтониана /2/ с найденным набором параметров КЭП.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

B/2/ на основе анализа измерений обратной магнитной восприимчивости параллельно и перпендикулярно оси с, а также полевой зависимости намагниченности для трех направлений /а, в, с / в кристалле ниже точки Кюри / T = 1,5 К/2 был предложен набор параметров КЭП. При этом предполагалось /2/, что на атоме Ni в NdNi, имеется магнитный момент, индуцированный слабым взаимодействием с близко расположенными редкоземельными ионами. Величины, характеризующие взаимодействия Nd-Ni, Ni-Ni определялись по экспериментально измеренным магнитным свойствам наряду с параметрами КЭП. Расчет спектров НМРТН на основе параметров КЭП, определенных таким способом, не мог описать измеренные спектры неупругого рассеяния от NdNi, В связи с этим интересно сравнить вычисленные на основе определенных в данной работе параметров КЭП восприимчивость, намагниченность и магнитный вклад в удельную теплоемкость с результатами работ /2,3/ посвяшенных их экспериментальному определению.

5

Магнитную восприимчивость системы парамагнитных ионов без учета магнитного взаимодействия между ионами можно представить в виде:

$$\chi_{a}^{0}(T) = (g_{J} \mu_{B})^{2} \sum_{n} \rho_{n} \sum_{k,l} \left[-2 \sum_{n \neq m} \frac{|\langle nk | J_{a} | ml \rangle|^{2}}{E_{n} - E_{m}} + \frac{1}{k_{B}T} |\langle nk | J_{a} | nl \rangle|^{2} \right], \quad /4/$$

где $\rho_n = Z \exp(-E_n/k_T)$ - заселенность n-го уровня, Z - статистическая сумма, индексы n, m нумеруют уровни КЭП, k, ℓ - волновые функции состояний в вырожденных уровнях, a = x, y, z.

Межионное обменное взаимодействие учитывалось в приближении молекулярного поля:

$$\chi^{-1}(T) = \chi^{0^{-1}}(T) - \lambda,$$
 /5/

где постоянная молекулярного поля определялась из условия расходимости восприимчивости вдоль направления спонтанной намагниченности при $T = T_c = 8 \text{ K}$: $\lambda = (\chi_M^0(x, y, z, W, T = T_c))^{-1}$ и составила $\lambda = 6,14$ моль/ЭМЕ.

На рис.3 приведена температурная зависимость обратной восприимчивости /сплошная линия/, рассчитанная по определенной в наших экспериментах схеме уровней /рис.2/, и результаты эксперимента ^{/2/} /точки/.

Расчет полевой зависимости намагниченности вдоль трех направлений a = x, y, z ($M_a = g_{\mu} \mu_B < J_a >$) в ферромагнитном состоянии при T = 1,5 К проводился в двухмерном приближении самосогласованного молекулярного поля /ПСМП/ с гамильтонианом:



$$\begin{split} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_{\mathrm{K}3\Pi} - \mathbf{g}_{\mathbf{J}} \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{B}} [\vec{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}^{+} \lambda \mathbf{g}_{\mathbf{J}} \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{B}}^{<} \vec{\mathbf{J}} >] \vec{\mathbf{J}} + \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{g}_{\mathbf{J}} \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{B}}^{-})^{2} < \vec{\mathbf{J}} >^{2}, \end{split}$$

где H_0 - внешнее магнитное поле, а параметр порядка $\langle \mathbf{J} \rangle$ есть $\langle \mathbf{J} \rangle = \mathbf{Z}^{-1} \sum_{\nu} \rho_{\nu} \langle \nu | \mathbf{J}_{\alpha} | \nu \rangle$, где суммирование ведется по всем (2J + 1) состояниям ν .

Рис.3. Зависимость обратной восприимчивости от температуры параллельно χ^{-1} и перпендикулярно $\chi^{-1}_{\perp c}$ осй с. Точки – экспериментальные значения /2/ сплошные линии – расчет, χ в моль/ЭМЕ.



Рис.4. Полевая зависимость намагниченности для трех направлений в кристалле NdNi₅ при T = 1,5 K. Точки – экспериментальные значения^{2/}, сплошная линия – расчет, M в $\mu_{\rm E}$ /NdNi₅.

На рис.4 представлены результаты вычисления компонент намагниченности /сплошная линия/ на основе значений параметров КЭП, определенных в экспериментах по HMPTH. Точки - результат, измерения намагниченности

в монокристаллическом образце NdNi₅^{/2/}. Магнитный вклад в удельную теплоемкость можно представить в виде

$$C_{\rm m} = T \frac{\partial S}{\partial T}$$
, (7/

где энтропия
$$S = \frac{\langle E \rangle}{T} + \ln Z$$
 и $\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_{\nu} \rho_{\nu} E_{\nu}$ Ниже температуры

Кюри энергии уровней вычисляются в рамках ПСМП с гамильтонианом /6/ при Н_о= 0. Выражение /7/ можно переписать в виде

$$C_{m}/R = (k_{B}T)^{-2} (\langle E^{2} \rangle - \langle E \rangle^{2}) + (k_{B}T)^{3} (\langle \vec{M} E \rangle - \langle \vec{M} \rangle \langle E \rangle)^{2} \times / (1 - \chi_{M}^{0} \cdot \lambda),$$
(8/

где χ_{M}^{0} - магнитная восприимчивость вдоль направления спонтанной намагниченности \vec{M} .

На рис.5 сплошной линией показана рассчитанная согласно /7/, /8/ температурная зависимость магнитного вклада в удельную теплоемкость NdNi₅, точки - результат эксперимента^{/3/}, где магнитный вклад определялся как разница в удельной теплоемкости NdNi₅ и LaNi -

Как видно из рис.3, рассчитанная обратная восприимчивость плохо совпадает с результатом эксперимента, особенно в области высоких температур. В то же время для ряда других соединений RNi_5 , где R = Tb, Ho, $Er^{/5,6}$ /было получено хорошее совпадение расчета и эксперимента. Введение магнитного момента на никеле $B^{/2/}$ позволило улучшить степень согласия, поэтому возможно, что наблюдаемое расхождение обусловлено вкладом никеля в восприимчивость.

Для намагниченности /рис.4/ и удельной теплоемкости /рис.5/, в целом, имеется неплохое согласие эксперимента и расчета на основе нейтрон-спектроскопических характеристик КЭП. Как и в слу-

6

7

Таблица



Рис.5. Магнитная часть удельной теплоемкости NdNi₅ в зависимости от температуры. Тонки – экспериментальные значения /3/, сплошная линия – расчет. С в Дж/моль · К.

чае восприимчивости, расчеты здесь выполнены без каких-либо подгоночных параметров. Небольшие расхождения в полевой зависимости намагниченности, возможно, также являются результатом наличия небольшого /по сравнению с моментом иона РЗМ/ магнитного момента на никеле. Несогласие в области фазового перехода между рассчитанной и измеренной теплоемкостью, на наш взгляд, является результатом использования ПСМП, которое плохо работает в окрестности фазового перехода.

Интересным моментом, возникающим при изучении интерметаллических соединений P3M, является вопрос о роли электронов проводимости в формировании кристаллического электрического поля/16/. С этой точки зрения целесообразно сравнить величины параметров КЭП в ряду изоструктурных соединений с близкими значениями параметров решетки RNi_s, которые были исследованы с помощью HMPTH.

В таблице приведены значения параметров КЭП A_{ℓ}^{m} . Эти параметры не зависят от свойств конкретного иона РЗМ и определяются только его окружением: $A_{\ell}^{m} = B_{\ell}^{m}/\theta_{\ell} < r^{\ell}$, где θ_{ℓ} - множитель Стивенса⁽⁹⁾, $< r^{\ell} >$ - радиальные интегралы^{/17/}.

Видно, что в таблице не наблюдается какого-либо закономерного изменения величин параметров КЭП A_{ℓ}^{m} при замене иона РЗМ в соединении, за исключением постоянства знака /кроме A_{6}^{o} в TmNi₅ /. Это весьма неожиданная ситуация, если принять во внимание тот факт, что параметры решетки изменяются от PrNi₅ к TmNi₅ всего на 2% (Δ a) и 0,5% (Δ c). Если предположить, что роль электронов проводимости сводится к экранировке ионных остовов, т.е. учитывать только ближайших соседей и попытаться оценить в модели эффективных точечных зарядов /МЭТЗ/ отношение величин A_{2}^{m} TmNi₅ к A_{2}^{0} PrNi₅ получим \approx 1,06, в то время как эксперимент дает для этого отношения величину \approx 3,26. Аналогичные расхождения оценок в рамках МЭТЗ с результатами эксперимента можно наблюдать и при сравнении A_{p}^{m} для других соединений RNi₅. Наибо-

Хим. формула	A2	A ⁰ 4	AG	A ⁰ ₆	Ссылка
PrNis	-75	-22,3	3,9	I24	. /4/
NdN:5	-108	-8,0	2,6	95	Настоящая работа
ThNis	-137	-9,8	5,9	190	/5/
HoNis	-215	-16,6	5,2	150	/6/
ErNis	-108	-44,3	9,1	52	/5/
Tm Nis	-245	-72,3	-29,6	123	/7/

Ошибка для параметра $A_2^0 = 3\%$, для A_4^0 , A_6^0 , $A_6^0 \approx 10\%$. Размерность A_ℓ^m [мэВ. \overline{A}], величины $\langle r \rangle$ для \Pr^{+3} из /18/6.

лее вероятной причиной наблюдаемого непостоянства A^m_ℓ является влияние электронов проводимости на потенциал КЭП, причем их роль не сводится к экранировке. По-видимому, имеется прямой кулоновский и обменный вклады в кристаллическое поле от электронов проводимости и их баланс определяет величину КЭП, которую "чувствует" 4f -оболочка иона РЗМ. Этот вывод согласуется с результатами , где обсуждалась возможность экспериментального определения отдельных вкладов в КЭП от электронов проводимости, и результатами работ /20,21/, где выполнены расчеты влияния электронов проводимости на КЭП в металлах, исходя из зонной структуры. На наш взгляд, проведение расчетов параметров КЭП для RNi₅ в духе работ /20,21/ позволило бы прояснить роль электронов проводимости в формировании кристаллического поля в металлических соединениях РЗМ.

Авторы признательны Ю.М.Останевичу за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

- Fulde P. In: Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth, vol.2, Ed. K.L.Gschneidner and L.Eyring, North-Holland, Amsterdam, 1978, p. 17.
- 2. Naît-Saada A. These, Institut National Polytechnique, de Grenoble, 1980.
- 3. Marzouk N. et al. J. Phys. Chem. Solids, 1973, vol. 34, p. 19.
- 4. Alekseev P.A. et al. phys.stat.sol.(b), 1980, vol.97, p. 87.

- Goremychkin E.A. et al. phys.stat.sol.(b), 1984, vol.121, p. 623.
- 6. Горемычкин Е.А. и др. ОИЯИ, Р14-83-738, Дубна, 1983.
- 7. Gignoux D. et al. In: Crystalline Electric Field Effects in f-Electron Magnetism. Ed. R.P.Guertin, W.Suski, Z.ZoJnierek, Plenum Press, New York and London, 1982, p.485.
- 8. Wallace W.E. Rare Earth Intermetallics. Academic Press, New York, 1973, chap.3.
- 9. Hutchings M.T. Solid State Physics, 1966, vol.16, p. 277.
- 10. Andres K. et al. Phys.Rev., 1979, B19, p. 5775.
- 11. De Gennes P.G.In: Magnetism (Ed. by G.T.Rado and H.Suhl) Academic Press, New York, 1963, vol.3, p. 113.
- 12. Балука Г. и др. ОИЯИ, Р13-84-242, Дубна, 1984.
- 13. Соколов С.Н., Силин И.Н. ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.
- 14. Горемычкин Е.А., Мюле Э. ОИЯИ, РЗ-83-172, Дубна, 1983.
- 15. Мюле Э. ОИЯИ, РЗ-83-133, Дубна, 1983.
- 16. Lüthi B. J.Mag.Mag.Mat., 1980, vol. 15-18, p. 1-8.
- 17. Freeman A.J., Desclaux J.P. J.Mag.Mag.Mat., 1979, vol.12, p.11.
- 18. Freeman A.J., Watson R.E. Phys.Rev., 1962, vol.127, p.2058.
- 19. Горемычкин Е.А., Мюле Э. Письма в ЖЭТФ, 1984, т.39, с.469.
- 20. Schmitt D. J.Phys.F., 1979, vol.9, p. 1745.
- 21. Schmitt D. J.Phys.F., 1979, vol.9, p. 1759.

Рукопись поступила в издательский отдел 14 сентября 1984 года.

Горемычкин Е.А. и др.

P14-84-632

Исследование кристаллического электрического поля в соединении NdNi₅ с помощью неупругого магнитного рассеяния тепловых нейтронов

Сообщаются результаты определения параметров гамильтониана гексагонального кристаллического электрического поля /КЭП/ для соединения NdNi₅ с помощью измерения неупругого рассеяния тепловых нейтронов. Для параметров КЭП получены следующие значения: $B_2^{0/=} 0,22 \text{ мэB}$, $B_4^0 = 0,54 \cdot 10^{-3} \text{ мэB}$, $B_6^0 = -0,33 \cdot 10^{-4} \text{ мэB}$, $B_6^6 = -0,12 \cdot 10^{-2} \text{ мэB}$. На основе определенных в экспериментах с нейтронами значений параметров КЭП проведено вычисление ряда макроскопических свойств и сравнение их с результатами эксперимента. Параметры КЭП в NdNi₅ сравниваются со значениями параметров КЭП в других соединениях RNi₅. Результаты сравнения обсуждаются с точки зрения влияния электронов проводимости на потенциал КЭП.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Goremychkin E.A. et al. Investigation of Crystalline Electric Field in NdNi₅ Compound by Inelastic Neutron Scattering

Results of inelastic neutron scattering in polycrystalline NdNi₅ are reported. From neutron spectra the parameters of the crystal field Hamiltonian for the hexagonal point symmetry of the Nd³⁺ ions in NdNi₅ are derived: $B_2^0 = 0.22 \text{ meV}_2$ $B_4^0 = 0.54 \cdot 10^{-3} \text{ meV}$, $B_6^0 = -0.33 \cdot 10^{-4} \text{ meV}$ and $B_6^{6} = -0.12 \cdot 10^{-2} \text{ meV}_2$. Using these values the magnetic susceptibility, the magnetization, and the magnetic contribution to the specific heat are calculated and compared with experimental data^{/2,3/}. The crystal field parameters for NdNi₅ are related to those of other compounds in the series RNi₅. The contribution from the conduction electrons to the crystal field in these compounds is discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1984