

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПОД ДАВЛЕНИЕМ СОЕДИНЕНИЙ 3d-МЕТАЛЛОВ С РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

Магницкая М. В., Боков А. В., Саламатин Д. А., Щелкачев Н. М., Цвященко А. В.

Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Россия

magma@yandex.ru

Представлено теоретическое и экспериментальное исследование магнитных свойств и сверхтонких взаимодействий в фазах Лавеса $R(T_{1-x}^{1}T_x^{2})_2$, R — щелочноземельный или редкоземельный металл, $T^{1,2} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$. Непрерывные ряды $R(T_{1-x}^{1}T_x^{2})_2$ были синтезированы при давлении 8 ГПа. Все полученные фазы кристаллизуются в кубической структуре типа MgCu_2 (C15). Отметим, что часть из них могут образовываться при нормальных условиях, а часть – только при высоких давлениях и температурах, характерных для недр Земли.

Проведены экспериментальные измерения эффекта Мёссбауэра на ядре ^{57}Fe . Выполнены первопринципные расчеты в рамках теории функционала плотности. На рис. 1 представлены концентрационные зависимости магнитного момента для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$; на рис. 2 – сверхтонкое поле на ядре Fe для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ и $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$. Вычисленные магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в целом согласуются с экспериментом.

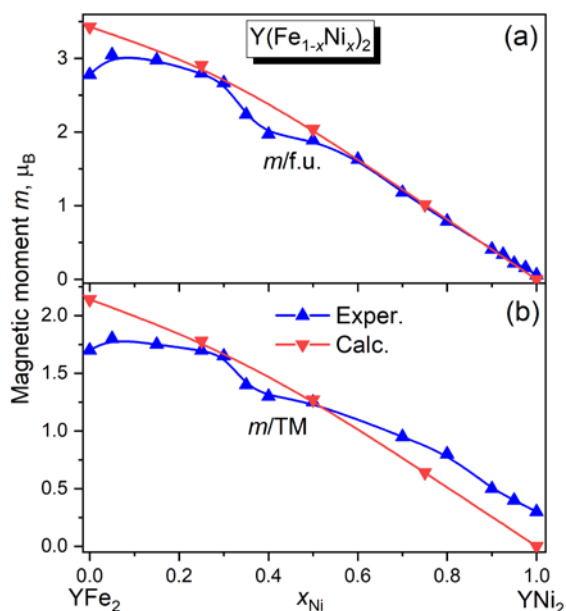


Рис. 1. Красным и синим цветом показаны экспериментальный и теоретический магнитный момент $m(x)$ для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ на формульную единицу (a) и на атом переходного металла (b).

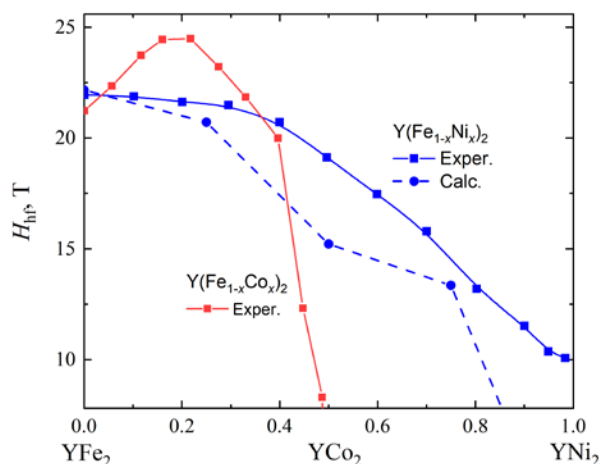


Рис. 2. Сверхтонкое магнитное поле H_{hf} на ядре железа как функция концентрации Ni или Co (x). Синим и красным цветом показаны результаты измерений для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$ и $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2$. Штриховая линия – расчет для $\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2$.

Некоторые соединения не удалось синтезировать при давлениях до 8 ГПа. Простые полуэмпирические оценки показали, что для их образования нужны более высокие давления. В настоящее время проводится строгий расчет этих давлений методом эволюционного поиска структур, получены предварительные результаты.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-22-00806.