

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 669.296'793'1:543.429.3

СВЕРХТОНКИЕ МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ НА ЯДРАХ ^{57}Fe В ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$

© 2019 г. В. С. Русаков^{a,*}, В. С. Показилов^b, Т. В. Губайдулина^a, М. Е. Мащев^a

^aМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991 Россия, Москва, Ленинские горы, 1

^bМИРЭА – Российский технологический университет, 119454 Россия, Москва, Проспект Вернадского, 78

*e-mail: rusakov@phys.msu.ru

Поступила в редакцию 08.10.2018 г.

После доработки 16.10.2018 г.

Принята к публикации 01.11.2018 г.

Проведены мёссбауэровские исследования анизотропии сверхтонких взаимодействий (СТВ) ядер ^{57}Fe в квазибинарной интерметаллической системе $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ ($0 \leq x \leq 1$) со структурой кубической фазы Лавеса C15. В рамках тензорного описания анизотропии магнитных СТВ с учетом кристаллической и магнитной структуры сверхтонкие параметры парциальных спектров выражены через константу квадрупольного взаимодействия, изотропное и анизотропное магнитные поля, а также азимутальный и полярный углы, задающие ориентацию оси легчайшего намагничивания (ОЛН). Установлено, что при температурах 87 и 297 К ОЛН отклонена в плоскости $(1\bar{1}0)$ от кристаллографического направления $[111]$ на $\sim 15^\circ$, и с ростом концентрации x ориентация ОЛН практически не меняется. Изменения изотропного поля и сдвига мессбауэровской линии носят аномальный характер. При увеличении x сначала наблюдается увеличение, а затем при $x > 0.4$ – уменьшение модуля изотропного поля. Сдвиг мессбауэровской линии уменьшается с увеличением x , при этом наблюдается излом при $x \sim 0.4$. Такое аномальное поведение изотропного поля и сдвига коррелирует с изменением параметра кристаллической решетки и магнитного момента атомов Fe. Анизотропное поле линейно уменьшается по мере увеличения концентрации атомов Sc, а константа квадрупольного взаимодействия остается практически постоянной ~ 1 мм/с.

Ключевые слова: анизотропия сверхтонких взаимодействий, мёссбауэровская спектроскопия, фаза Лавеса C15, ось легчайшего намагничивания, сверхтонкие параметры спектра

DOI: 10.1134/S0015323019040119

ВВЕДЕНИЕ

Интерметаллические соединения стехиометрического состава $R\text{Fe}_2$ (R – 3d-, 4d- или 5d-элементы), кристаллизующиеся в структурных типах фаз Лавеса, являются прекрасными модельными объектами для исследования сверхтонких взаимодействий (СТВ) ядер ^{57}Fe . Наличие широких рядов твердых растворов замещения обоих компонентов предоставляют исследователям возможность изучать многообразие механизмов и особенностей СТВ, взаимосвязь параметров таких взаимодействий с локальными характеристиками вещества.

Известно большое число работ, посвященных исследованию СТВ в фазах Лавеса $R\text{Fe}_2$ (см., напр., [1–9]). Однако механизмы СТВ изучены недостаточно. Отметим, в частности, такие нерешенные вопросы, как природа анизотропии магнитных СТВ, а также характер поведения параметров СТВ в процессе замещения одних компонентов другими. Существенным шагом в исследовании СТВ стало использование тензорного описания магнитных СТВ [2, 4, 6], которое позволяет непо-

средственно из мессбауэровских спектров получать все необходимые параметры СТВ и с большой точностью определять ориентацию оси легчайшего намагничивания (ОЛН).

Настоящая работа посвящена мёссбауэровским исследованиям анизотропии СТВ ядер ^{57}Fe в квазибинарной интерметаллической системе $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ во всем интервале составов $0 \leq x \leq 1$ с привлечением данных рентгеновских и магнитных измерений.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Образцы системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ ($x = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0$) выплавляли из смесей высокочистых металлов в атмосфере аргона в дуговой печи с водоохлаждаемым медным столом. Слитки размельчали и переплавляли несколько раз.

Рентгенографические измерения образцов показали, что образцы являются однофазными и имеют кубическую структуру типа MgCu_2 (C15).

Мёссбауэровский эксперимент на ядрах ^{57}Fe проводили с использованием спектрометра MS-1104Em с азотным криостатом в геометрии на прохождение в режиме постоянных ускорений с треугольной формой временной зависимости доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя. В качестве мёссбауэровского источника использовали ^{57}Co в матрице Rh. Калибровку осуществляли с помощью эталонного образца металлического $\alpha\text{-Fe}$. Мёссбауэровские измерения проводили при комнатной температуре и температуре 87 K.

Модельная расшифровка экспериментальных спектров осуществлена методом наименьших квадратов с помощью программы SpectrRelax [10] в рамках тензорного подхода к описанию анизотропии СТВ ядер ^{57}Fe в соединениях $R\text{Fe}_2$ с кубической структурой C15.

ТЕНЗОРНЫЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ АНИЗОТРОПИИ СТВ

Исследованные соединения при температурах проведения мёссбауэровского эксперимента (RT и 87 K) находятся в магнитоупорядоченном состоянии и имеют структурный тип кубической фазы Лавеса C15 с пространственной группой симметрии $O_h^7 - Fd\bar{3}m$. Атомы железа в структуре этих соединений расположены в кристаллографически эквивалентных позициях 16(d) — в вершинах тетраэдров (точечная симметрия $\bar{3}m$) с инверсионными осями симметрии третьего порядка в направлениях $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}1\bar{1}]$. В связи с этим, в общем случае произвольной ориентации оси легчайшего намагничивания (ОЛН) позиции атомов Fe с различными ориентациями осей симметрии становятся неэквивалентными в магнитном отношении и в отношении СТВ. Из-за различных значений углов между направлением эффективного магнитного поля и главными осями тензора градиента электрического поля (ГЭП) в области расположения ядра параметры СТВ для атомов, расположенных в разных вершинах тетраэдра, становятся различными. В таком случае в экспериментальном мёссбауэровском спектре будут наблюдаться четыре ($i = 1, 2, 3, 4$) различных зеемановских секстета, сверхтонкие параметры которых — квадрупольные смещения компонент $\epsilon^{(i)}$ и эффективные магнитные поля $H_n^{(i)}$ — оказываются взаимосвязанными (см. рис. 1).

В соответствии с предложенным в [2, 4] подходом к описанию сверхтонких магнитных взаимодействий, позволяющим в явной форме учесть их анизотропный характер, представим сверхтонкое магнитное поле (СТМП) в области расположения ядра $\mathbf{H}_n$ в тензорном виде:

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{A} \cdot \mathbf{m}_{\text{Fe}}, \quad (1)$$

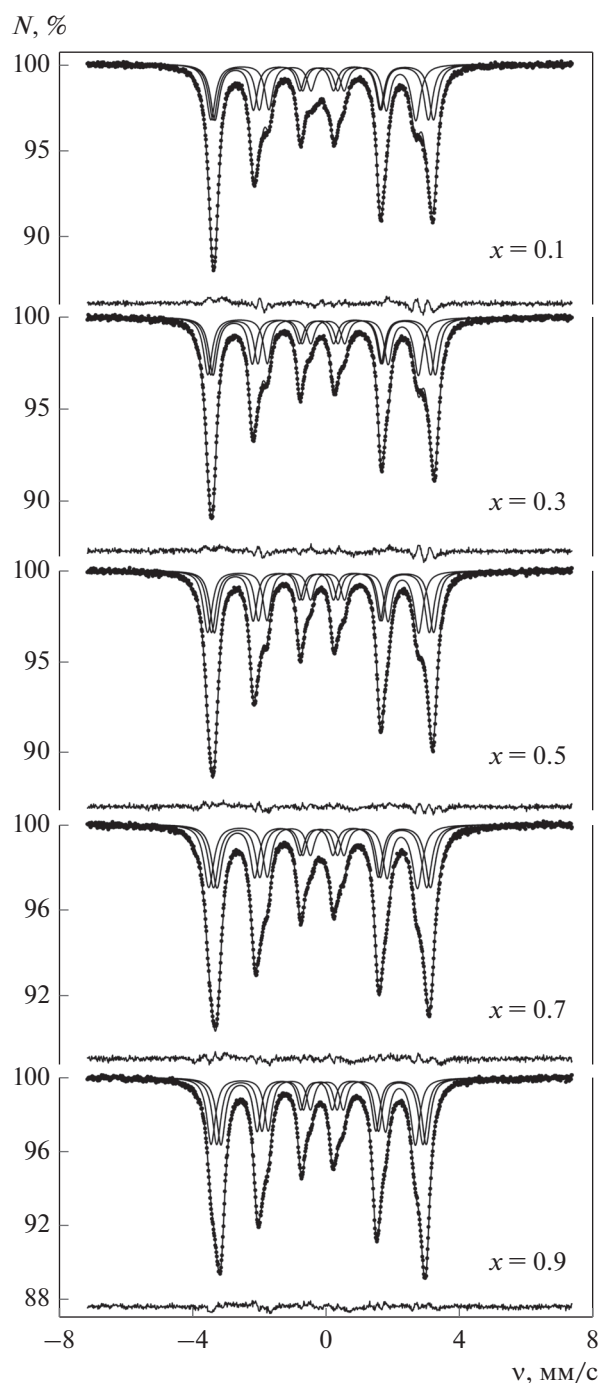


Рис. 1. Модельная расшифровка характерных мёссбауэровских спектров ядер ^{57}Fe в исследованных соединениях системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$, полученных при 297 K.

где $\mathbf{m}_{\text{Fe}}$ — единичный вектор вдоль направления магнитного момента $\boldsymbol{\mu}_{\text{Fe}}$ атома железа, $\mathbf{A}$ — тензор сверхтонких взаимодействий:

$$\mathbf{A} \equiv \{A_{ij}\} = \begin{pmatrix} A_x & 0 & 0 \\ 0 & A_y & 0 \\ 0 & 0 & A_z \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Здесь тензор $\mathbf{A}$ представлен в своих собственных осях координат.

В общем случае поле $\mathbf{H}_n$ можно представить в виде суммы двух вкладов — изотропного $\mathbf{H}_{is}$ и анизотропного $\mathbf{H}_{an}$:

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{H}_{is} + \mathbf{H}_{an}, \quad (3)$$

где $\mathbf{H}_{an}$ — составляющая поля, проекция которой на направление $\mathbf{m}_{Fe}$ при усреднении по всем возможным направлениям $\mathbf{m}_{Fe}$ дает нулевое значение:

$$\langle (\mathbf{H}_{an} \mathbf{m}_{Fe}) \rangle = 0. \quad (4)$$

Изотропный вклад H_{is} в СТМП H_n , определяется в основном контактным взаимодействием Ферми с локализованными на ядре s -электронами и коллективизированными электронами проводимости, поляризованными как магнитным моментом атома Fe, так и магнитными моментами окружающих атомов. Анизотропный вклад H_{an} обусловлен магнитным диполь-дипольным взаимодействием с локализованными магнитными моментами окружающих атомов и анизотропией сверхтонкого магнитного взаимодействия ядра с электронами катионного остова собственного атома.

При тензорном описании изотропная и анизотропная части поля H_n описываются соответствующими тензорами:

$$\mathbf{H}_{is} = A_{is} \cdot \mathbf{m}_{Fe}, \quad \mathbf{H}_{an} = \mathbf{A}_{an} \cdot \mathbf{m}_{Fe}. \quad (5)$$

При этом тензор СТВ $\mathbf{A}$ содержит изотропную A_{is} и анизотропную $\mathbf{A}_{an}$ составляющие:

$$\mathbf{A} = A_{is} + \mathbf{A}_{an} = A_{is} \mathbf{E} + \mathbf{A}_{an} \mathbf{S}, \quad (6)$$

где A_{is} и A_{an} — изотропное и анизотропное поля, $\mathbf{E}$ — единичная матрица, $\mathbf{S}$ — тензор, след которого равен нулю:

$$\text{Sp}(\mathbf{S}) = 0. \quad (7)$$

С учетом изложенных формул изотропное и анизотропное поля равны:

$$\begin{aligned} A_{is} &= (A_x + A_y + A_z)/3; \\ A_{an} &\equiv (2A_z - A_x - A_y)/6. \end{aligned} \quad (8)$$

В результате применения тензорного формализма приходим к следующему представлению вкладов в СТМП в тензорном виде:

$$\mathbf{H}_{is} = A_{is} \mathbf{E} \cdot \mathbf{m}_{Fe}, \quad \mathbf{H}_{an} = \mathbf{A}_{an} \mathbf{S} \cdot \mathbf{m}_{Fe}. \quad (9)$$

В структуре $R\text{Fe}_2$ атомы железа расположены в вершинах тетраэдров с точечной симметрией $\bar{3}m$ и осями симметрии третьего порядка в направлениях $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ и $[\bar{1}1\bar{1}]$.

С учетом точечной симметрии позиций атомов Fe в структуре $R\text{Fe}_2$, тензор сверхтонких взаимодействий $\mathbf{A}$ задается лишь двумя независимыми компонентами:

$$A_{\perp} = A_x = A_y, \quad A_{\parallel} = A_z \quad (10)$$

и в собственных осях координат имеет следующий вид:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & A_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & A_{\parallel} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

При переходе к кристаллографическим осям форма представления тензора $\mathbf{A}$ окажется различной для четырех типов позиций атомов Fe:

$$\mathbf{A}^{(i)} = \mathbf{A}_{is} + \mathbf{A}_{an}^{(i)}. \quad (12)$$

При этом

$$\mathbf{A}_{is} = A_{is} \mathbf{E} = (A_{\parallel} + 2A_{\perp})/3 \cdot \mathbf{E}, \quad (13)$$

$$\mathbf{A}_{an}^{(i)} = A_{an} \mathbf{S}^{(i)} = (A_{\parallel} - A_{\perp})/3 \cdot \mathbf{S}^{(i)}. \quad (14)$$

Вид матрицы $\mathbf{S}^{(i)}$ зависит от направления локальной инверсионной оси симметрии третьего порядка для рассматриваемой позиции атома железа:

$$\mathbf{S}^{(1)} \equiv \mathbf{S}^{[111]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (15)$$

$$\mathbf{S}^{(2)} \equiv \mathbf{S}^{[\bar{1}\bar{1}1]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (16)$$

$$\mathbf{S}^{(3)} \equiv \mathbf{S}^{[1\bar{1}\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (17)$$

$$\mathbf{S}^{(4)} \equiv \mathbf{S}^{[\bar{1}1\bar{1}]} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Все позиции атомов Fe в элементарной ячейке $R\text{Fe}_2$ эквивалентны в кристаллографическом отношении. Однако из-за различных ориентаций локальных осей симметрии в общем случае они не эквивалентны в отношении СТВ, и мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe представляет собой совокупность четырех секстетов, каждому из которых в общем случае соответствуют свои сверхтонкие параметры спектра: $\delta^{(i)}$, $\epsilon^{(i)}$ и $H_n^{(i)}$.

Поскольку в соединениях $R\text{Fe}_2$ атомы Fe находятся в кристаллографически эквивалентных позициях, то несмотря на наличие малых искажений ($\sim 10^{-3}$), возникающих из-за спонтанной стрикции, можно считать сдвиги $\delta^{(i)}$ одинаковыми для всех позиций атомов железа: $\delta^{(i)} = \delta$.

Квадрупольное смещение $\epsilon^{(i)}$ компонент спектров зависит от угла $\alpha^{(i)}$ между направлением сверхтонкого магнитного поля $\mathbf{H}_n$ (практически совпадающего с ОЛН) и направлением градиента электрического поля:

$$\epsilon^{(i)} = \frac{e^2 q Q}{4} \frac{3 \cos^2 \alpha^{(i)} - 1}{2}, \quad (19)$$

где e^2qQ — константа квадрупольного взаимодействия.

В общем случае углы $\alpha^{(i)}$ неодинаковы, поэтому смещение $\epsilon^{(i)}$ будет различно для разных положений атомов Fe. Если задать направление ОЛН углами φ и ϑ в полярной системе координат, то значение $\epsilon^{(i)}$ будет равно

$$\cos^2 \alpha^{(i)} = \frac{1}{3} \frac{(1 + F^{(i)})(1 + 4a_{\text{an}} + 4a_{\text{an}}^2)}{1 + 2F^{(i)}a_{\text{an}} + (2 + F^{(i)})a_{\text{an}}^2}, \quad (20)$$

где

$$a_{\text{an}} = A_{\text{an}}/A_{\text{is}}, \quad (21)$$

$$F^{(1)} = +\sin^2 \vartheta \sin 2\varphi + \sin 2\vartheta \cos \varphi + \sin 2\vartheta \sin \varphi, \quad (22)$$

$$F^{(2)} = +\sin^2 \vartheta \sin 2\varphi - \sin 2\vartheta \cos \varphi - \sin 2\vartheta \sin \varphi, \quad (23)$$

$$F^{(3)} = -\sin^2 \vartheta \sin 2\varphi - \sin 2\vartheta \cos \varphi + \sin 2\vartheta \sin \varphi, \quad (24)$$

$$F^{(4)} = -\sin^2 \vartheta \sin 2\varphi + \sin 2\vartheta \cos \varphi - \sin 2\vartheta \sin \varphi. \quad (25)$$

Значения эффективного магнитного поля $H_n^{(i)}$ также будут различны для четырех позиций атомов Fe в структуре $R\text{Fe}_2$:

$$H_n^{(i)} = A_{\text{is}} \left\{ 1 + 2F^{(i)}a_{\text{an}} + [F^{(i)} + 2]a_{\text{an}}^2 \right\}^{1/2}. \quad (26)$$

Для определения ориентации ОЛН и интересующих нас параметров СТВ необходимо знать их взаимосвязь с параметрами парциальных спектров. Поскольку для ядер ^{57}Fe в $R\text{Fe}_2$ константа квадрупольного взаимодействия $e^2qQ \sim 1$ мм/с, необходимо учесть квадрупольное взаимодействие во втором порядке малости. В этом случае положение компонент зеемановских секстетов будут равны:

$$\nu_{1,6}^{(i)} = \delta + \epsilon^{(i)} \mp a_+^{(i)} \mp \mu_n \frac{|g_g| + 3|g_e|}{2} H_n^{(i)}; \quad (27)$$

$$\nu_{2,5}^{(i)} = \delta - \epsilon^{(i)} \pm a_-^{(i)} \mp \mu_n \frac{|g_g| + |g_e|}{2} H_n^{(i)}; \quad (28)$$

$$\nu_{3,4}^{(i)} = \delta - \epsilon^{(i)} \mp a_-^{(i)} \mp \mu_n \frac{|g_g| - |g_e|}{2} H_n^{(i)}. \quad (29)$$

Здесь μ_n — ядерный магнетон, g_g и g_e — g -факторы основного и возбужденного состояний ядра и

$$a_{\pm}^{(i)} = \frac{3e^2qQ}{16} \frac{e^2qQ}{g_e\mu_n H_n^{(i)}} \times \left[\cos^2 \alpha^{(i)} \pm \frac{\sin^2 \alpha^{(i)}}{8} \right] \sin^2 \alpha^{(i)}. \quad (30)$$

Как видим, учет априорной информации о кристаллической и магнитной структурах соединений типа $R\text{Fe}_2$ в рамках тензорного описания анизотропии сверхтонких магнитных взаимодей-

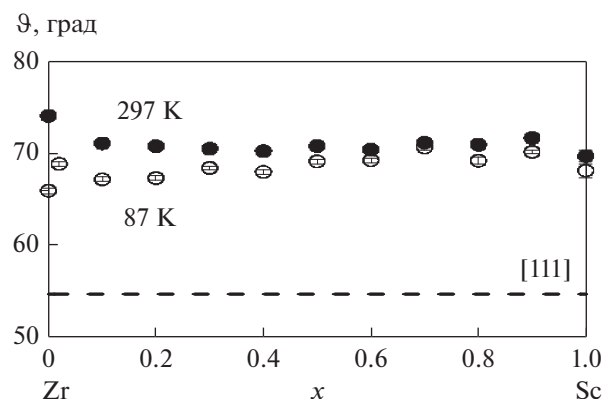


Рис. 2. Концентрационные зависимости полярного угла ϑ , задающего направление ОЛН в соединениях системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$.

ствий позволяет существенно уменьшить число параметров, задающих положения компонент спектра. При этом все эти параметры — $\{\delta, e^2qQ, \varphi, \vartheta, A_{\text{is}}, A_{\text{an}}\}$ имеют физический смысл и являются, как правило, предметом поиска. Зная значения этих параметров, можно с помощью изложенных выше формул осуществить следующую цепочку преобразований:

$$\{\delta, e^2qQ, \varphi, \vartheta, A_{\text{is}}, A_{\text{an}}\} \rightarrow \{\delta^{(i)}, \epsilon^{(i)}, H_n^{(i)}\} \rightarrow \{\nu_j^{(i)}\}. \quad (31)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Обработка экспериментальных спектров осуществлена методом наименьших квадратов с помощью программы SpectrRelax [10] в рамках тензорного подхода к описанию анизотропии СТВ ядер ^{57}Fe в соединениях $R\text{Fe}_2$ с кубической структурой C15. В результате удалось найти оптимальные значения интересующих нас физических величин — $\{\delta, e^2qQ, \varphi, \vartheta, A_{\text{is}}, A_{\text{an}}\}$.

Полученные значения полярного угла ϑ показывают, что в соединениях системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ ОЛН отклонена от кристаллографического направления $[111]$ на $\sim 15^\circ$ и лежит в плоскости $(1\bar{1}0)$ ($\varphi = 45^\circ$). При этом ориентация ОЛН практически не изменяется с ростом концентрации атомов Sc (см. рис. 2).

На рис. 3 представлены концентрационные зависимости изотропного A_{is} и анизотропного A_{an} сверхтонких магнитных полей на ядрах ^{57}Fe в соединениях $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$. Для соединений $R\text{Fe}_2$ с кубической структурой фаз Лавеса C15 анизотропное поле в соответствии с (3), (9) и (15)–(18) равно среднему по четырем неэквивалентным в отношении СТВ позициям атомов Fe сверхтонкому магнитному полю:

$$\bar{H}_n = H_{\text{is}} = A_{\text{is}} \mathbf{m}_{\text{Fe}}. \quad (32)$$

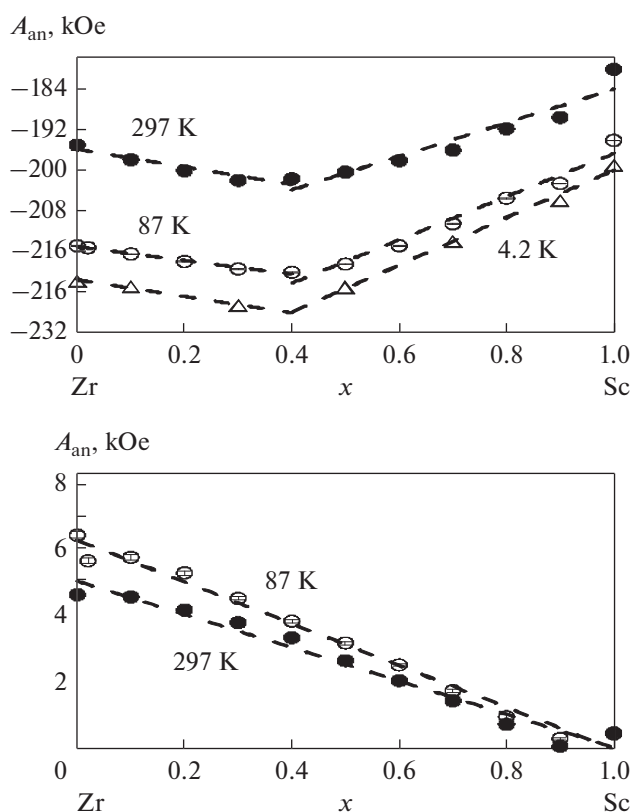


Рис. 3. Концентрационные зависимости изотропного A_{is} и анизотропного A_{an} сверхтонких магнитных полей для спектров ядер ^{57}Fe в соединениях $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$.

Поэтому на рис. 3 представлена также концентрационная зависимость среднего СТМП $\bar{H}_n$, полученная при 4.2 К с помощью ЯМР [3]. Как видим, изменение изотропного A_{is} (и среднего $\bar{H}_n$) поля носит аномальный характер: при увеличении концентрации атомов Sc в системе сначала (при $0 \leq x \leq 0.4$) наблюдается увеличение, а затем (при $0.4 \leq x \leq 1$) — уменьшение модуля изотропного поля (рис. 3).

Отметим, что согласно данным рентгеновских исследований системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$, такое поведение изотропного поля A_{is} коррелирует с изменением параметра кристаллической решетки a [3], который слабо возрастает в интервале концентраций атомов Sc $0 \leq x \leq 0.4$ и заметно уменьшается в интервале концентраций $0.4 \leq x \leq 1$ (см. рис. 4). Известно, что для фаз Лавеса с кубической структурой при увеличении межатомного расстояния между ближайшими атомами железа (при расширении решетки) магнитный момент на атомах железа увеличивается почти линейно. Этот эффект наблюдается и для системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ (см. рис. 4).

Наличие корреляции в поведении изотропного поля A_{is} и магнитного момента μ_{Fe} атома Fe (см. рис. 3 и рис. 4) подтверждает, что одним из основ-

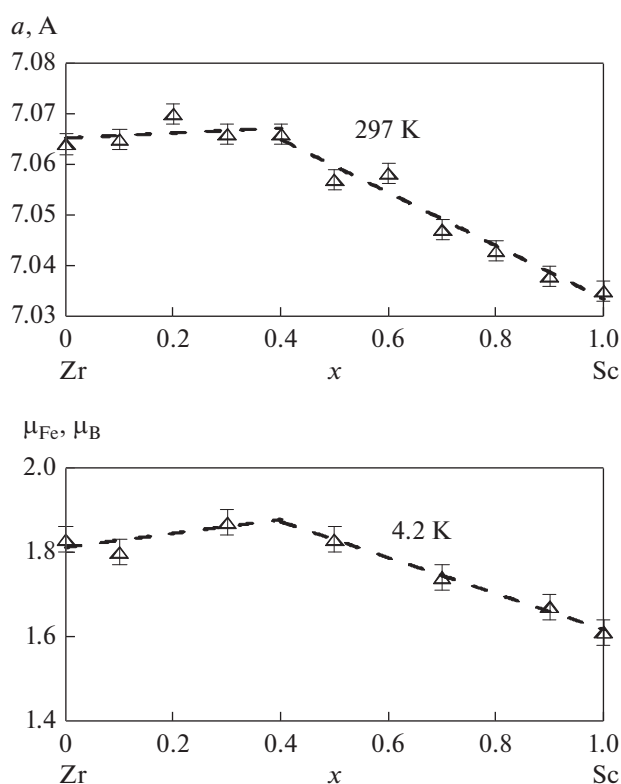


Рис. 4. Концентрационные зависимости параметра элементарной ячейки a (при 297 К) и магнитного момента μ_{Fe} атома Fe (при 4.2 К) для соединений системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ [3].

ных механизмов формирования изотропного поля A_{is} является контактное взаимодействие Ферми с локализованными на ядре s-электронами и коллективизированными электронами проводимости, поляризованными магнитным моментом атома Fe.

Что касается анизотропного поля A_{an} , то оно практически линейно уменьшается (рис. 3) с увеличением концентрации атомов Sc. Попытка объяснить наблюдаемое поведение анизотропного поля магнитным диполь-дипольным взаимодействием с локализованными магнитными моментами окружающих атомов не увенчалась успехом. По-видимому, как и в случае других соединений типа $R\text{Fe}_2$ [2], в данном случае существенную роль играет анизотропия сверхтонкого магнитного взаимодействия ядра с электронами катионного остова собственного атома.

Модельная расшифровка мессбауэровских спектров системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$ показала, что по мере увеличения концентрации Sc в образцах наблюдается уменьшение сдвига мессбауэровской линии δ как при комнатной температуре, так и при $T = 87$ К. Причем в области $x = 0.4$ эти зависимости претерпевают излом (см. рис. 5), что коррелирует с концентрационной зависимостью пара-

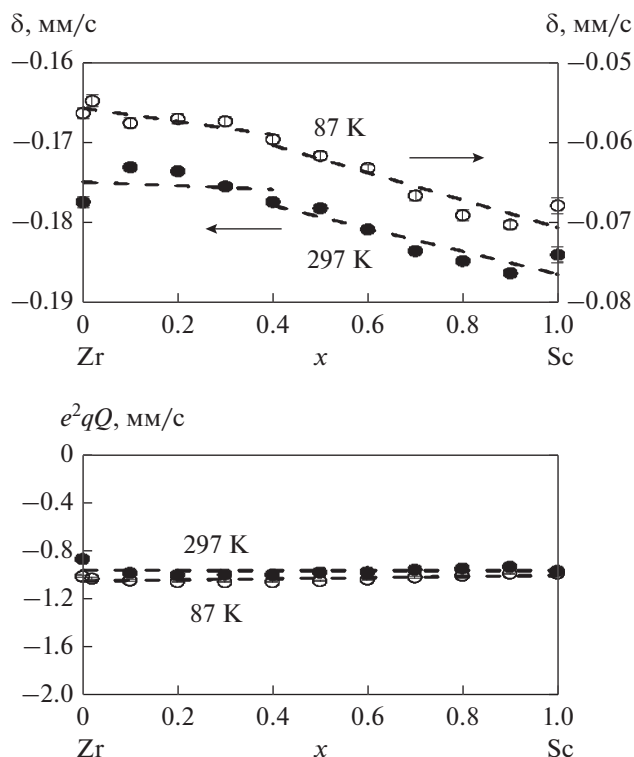


Рис. 5. Концентрационные зависимости сдвига мёссбауэровской линии δ и константы квадрупольного взаимодействия e^2qQ для соединений системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$.

метра кристаллической решетки a (рис. 4). При этом константа квадрупольного взаимодействия e^2qQ остается практически постоянной ~ 1 мм/с во всем интервале концентраций Sc (рис. 5).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В рамках тензорного подхода к описанию анизотропии магнитных сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe найдены оптимальные значения интересующих нас физических величин $\{\delta, e^2qQ, \varphi, \vartheta, A_{\text{is}}, A_{\text{an}}\}$ для всех исследованных соединений системы $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Fe}_2$.

Обнаружено, что изменение изотропного магнитного поля A_{is} и сдвига мёссбауэровской линии δ как при комнатной температуре, так и при $T = 87$ К с ростом концентрации атомов Sc носит аномальный характер: в области $x = 0.4$ зависимости $\delta(x)$ и $A_{\text{is}}(x)$ претерпевают излом. При этом с увеличением концентрации атомов Sc поле A_{is} сначала убывает и затем возрастает, а сдвиг δ убывает во всем диапазоне концентраций.

Установлена корреляция концентрационных зависимостей сверхтонких параметров $A_{\text{is}}(x)$ и

$\delta(x)$ с данными рентгеновских и магнитных измерений.

Показано, что анизотропное поле A_{an} практически линейно уменьшается по мере увеличения концентрации Sc.

Установлено, что константа квадрупольного взаимодействия e^2qQ остается практически постоянной ~ 1 мм/с во всем интервале концентраций атомов Sc.

Выявлено, что ОЛН отклонена от направления $[111]$ на $\sim 15^\circ$ и лежит в плоскости $(1\bar{1}0)$, при этом ориентация ОЛН практически не изменяется с ростом концентрации атомов Sc.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raj P., Kulshreshtha S.K. Magnetically induced quadrupole interactions and anisotropic hyperfine fields at Fe-sites in RFe_2 -compounds // J. Physique. 1980. V. 41. P. 1487–1494.
2. Meyer C., Hartmann-Boutron F., Gros Y., Berthier Y., Buevoz J.L. Detailed study of NdFe_2 and additional results relative to PrFe_2 and YbFe_2 . Comparison with other R.E. Fe_2 compounds // J. Physique. 1981. V. 42. P. 605–620.
3. Покатилов В.С., Голикова В.В., Сидохин Е.Ф. Сверхтонкие поля и магнитные моменты в интерметаллических соединениях Лавеса с кубической структурой $\text{Sc}_{1-x}\text{Zr}_x\text{Fe}_2$ ($0 \leq x \leq 1$) // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. С. 2079–2089.
4. Николаев В.И., Русаков В.С., Солодченкова Т.Б. Кинетика спиновой переориентации при наличии анизотропии сверхтонких взаимодействий // Изв. АН СССР. Сер. Физическая. 1990. Т. 54. № 9. С. 1681–1685.
5. Pokatilov V.S. Hyperfine fields and magnetic moments in Laves phase compounds RFe_2 ($\text{R} = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Zr}, \text{Gd}, \text{Ce}, \text{Lu}$) // JMMM. 1998. V. 189. P. 189–194.
6. Русаков В.С. Мессбауэровская спектроскопия локально неоднородных систем. Алматы: ИЯФ НЯЦ РК, 2000. 431 с.
7. Покатилов В.С. Сверхтонкие взаимодействия в кубических сплавах Лавеса $\text{Sc}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_2$ // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. № 1. С. 71–78.
8. Wiertel M., Surowiec Z., Budzyński M., Sarzyński J., Beskrovnyi A.I. Magnetic and structural properties of $\text{Sc}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ Laves phases studied by Mössbauer spectroscopy and neutron diffraction // Nukleonika. 2015. V. 60. P. 155–160.
9. Вершинин А.В., Наумов С.П., Сериков В.В., Клейнерман Н.М., Мушников Н.В., Русаков В.С. Параметры сверхтонкого взаимодействия и магнитный фазовый переход антиферромагнетик–ферромагнетик в $\text{Ce}(\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ // ФММ. 2016. Т. 117. № 12. С. 1234–1240.
10. Matsnev M.E., Rusakov V.S. SpectrRelax: an application for Mössbauer spectra modelling and fitting // AIP Conference Proceedings. 2012. V. 1489. P. 178–185.