

## НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ В $\text{PrV}_6$

*Е. В. Нефедова<sup>a</sup>, Н. Н. Тиден<sup>a</sup>, К. Сименсмейер<sup>b,\*</sup>, П. А. Алексеев<sup>a</sup>,  
В. Н. Лазуков<sup>a,\*\*</sup>, И. П. Садиков<sup>a</sup>, Н. Ю. Шицевалова<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> РИЦ «Курчатовский институт», ИСФТТ  
123182, Москва, Россия

<sup>b</sup> Hahn Meitner Institute, Glienicker Str 100  
D 14109, Berlin, Germany

<sup>c</sup> Институт проблем материаловедения Национальной академии наук Украины  
252142, Киев, Украина

Для изучения роли различных физических механизмов в формировании свойств основного состояния иона  $\text{Pr}$  в  $\text{PrV}_6$  проведены измерения спектра магнитных возбуждений в парамагнитной и магнитно-упорядоченных фазах поликристаллического  $\text{PrV}_6$ . Экспериментально установлено, что основным состоянием иона  $\text{Pr}$  в парамагнитной фазе является триплет  $\Gamma_5$ . При переходе в магнитоупорядоченное состояние триплет расщепляется на три синглетных уровня. Полученные результаты не исключают возникновения дополнительного вклада в расщепление за счет понижения локальной симметрии из-за структурных искажений.

PACS: 29.30.Hs, 71.70.Ch, 75.10.Dg

Редкоземельное соединение на основе некрамерсовского иона гексаборид празеодима ( $\text{PrV}_6$ ) является антиферромагнетиком с температурой магнитного упорядочения  $T_N \approx 7$  К [1]. Измерения теплоемкости [2] и намагниченности [3] показали, что при температуре  $T_2 \approx 4$  К имеет место второй фазовый переход. Природа последнего перехода является предметом интенсивных исследований и дискуссий, см. работу [4] и ссылки в ней.

Наряду с взаимодействием с кристаллическим электрическим полем и дипольным обменным взаимодействием в качестве возможной причины перехода при  $T \approx 4$  К предполагается квадрупольное взаимодействие. Кроме того, рассматривается возможность появления структурных искажений при этом фазовом переходе.

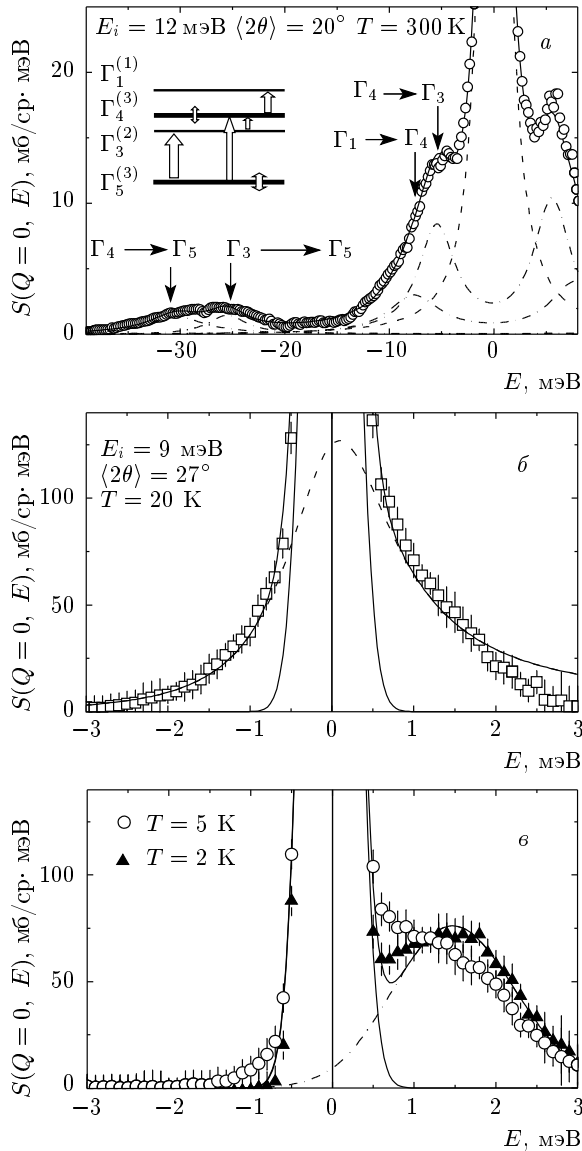
Для определения возможной роли различных физических механизмов в формировании свойств основного состояния в магнитоупорядоченных фазах в качестве первого шага проведено исследо-

вание температурной эволюции спектра магнитных возбуждений  $\text{PrV}_6$  и определение схемы уровней  $4f$ -электронов ионов церия в кристаллическом электрическом поле. Для уменьшения поглощения нейтронов при изготовлении образцов использовался изотоп  $^{11}\text{V}$  (степень обогащения около 99.52%). Измерения проводились методом неупругого рассеяния нейтронов на поликристалле  $\text{Pr}^{11}\text{V}_6$  ( $m = 6$  г) на спектрометре по времени пролета NEAT (BENSC, Берлин) с начальной энергией нейтронов  $E_0 = 12, 9$  мэВ в широкой области температур 2–300 К. Величина разрешения (полная ширина на полувысоте упругого пика ванадиевого стандарта) составляла соответственно  $\delta E = 1.5, 0.5$  мэВ. Для оценки немагнитной составляющей функции рассеяния использовались измерения немагнитного аналога  $\text{La}^{11}\text{V}_6$  ( $m = 5$  г). Для абсолютной калибровки спектров неупругого рассеяния нейтронов на  $\text{PrV}_6$  использовался ванадиевый стандарт.

На рисунке представлены спектры магнитных возбуждений  $\text{PrV}_6$  при температурах 300 К (а), 20 К (б), 2 К и 5 К (в). При  $T = 300$  К спектр содержит квазиупругий и неупругие пики, связанные с перехо-

\*К. Siemensmeyer

\*\*E-mail: lvn@issph.kiae.ru



Спектр магнитных возбуждений  $\text{PrB}_6$  при  $T = 300 \text{ K}$  (а),  $20 \text{ K}$  (б),  $2 \text{ K}$  и  $5 \text{ K}$  (в). Линии — подгонка спектра: штрихпунктир — неупругий пик; пунктир — квазиупругий пик; тонкая сплошная линия — упругий пик; толстая сплошная линия — суммарная подгонка. На рис. в показана подгонка спектра, полученного при  $T = 2 \text{ K}$ . Вставка на рис. а — схема расщепления основного мультиплета  $^3\text{H}_4$  иона  $\text{Pr}^{3+}$  в кристаллическом электрическом поле кубической симметрии

дами между уровнями мультиплета  $^3\text{H}_4$  иона  $\text{Pr}^{3+}$ , расщепленного в кристаллическом электрическом поле кубической симметрии. Число пиков, их положение и соотношения интенсивностей хорошо соответствуют схеме уровней кристаллического электри-

ческого поля, предложенной в работе [5]. Экспериментально полученное значение сечения магнитного рассеяния на ионах  $\text{Pr}^{3+}$  оказалось равным около  $6.6 \text{ б}$ , что соответствует расчетному значению для  $\text{Pr}^{3+}$   $J = 4$  и указывает на то, что при этой температуре в спектрах наблюдаются все возможные переходы. При понижении температуры от  $80 \text{ K}$  до  $20 \text{ K}$  в измеряемом интервале энергий спектра наблюдается только квазиупругое магнитное рассеяние (рис. б), так как в соответствии с температурным фактором для данной схемы уровней заселено только основное состояние и спектр с приобретением энергии нейтроном не должен содержать неупругих пиков. Квазиупругое магнитное рассеяние в спектре магнитных возбуждений  $\text{PrB}_6$  при  $T \geq 20 \text{ K}$  экспериментально было обнаружено впервые. Измеренные спектры и полученные данные о сечении магнитного рассеяния подтверждают предложенную ранее [5] схему расщепления основного мультиплета ( $J = 4$ ) иона  $\text{Pr}$  с основным состоянием триплет  $\Gamma_5$  для парамагнитной фазы.

При понижении температуры ниже  $T_N$  квазиупругое рассеяние трансформируется в неупругое (рис. в) с  $E = 0.85 \pm 0.09 \text{ мэВ}$ . При этом ширина неупругого пика составляет около  $2 \text{ мэВ}$ . При температуре  $T < T_2$  энергия неупругого пика увеличивается,  $E = 1.0 \pm 0.1 \text{ мэВ}$ .

В области температур между двумя фазовыми переходами ( $T = 5 \text{ K}$ ) появление неупругого рассеяния в спектре магнитных возбуждений свидетельствует о расщеплении  $\Gamma_5$  триплета в магнитном поле. Предварительная оценка величины внутреннего магнитного поля  $H_z \approx 6 \text{ Тл}$ .

Увеличение энергии неупругого пика при температуре  $T < T_2$  является следствием второго фазового перехода. Механизмом, за счет которого увеличивается энергия неупругого пика, может быть как увеличение внутреннего магнитного поля, так и искажения, вызванные квадрупольным упорядочением. Наблюдаемая существенная ширина неупругого пика около  $2 \text{ мэВ}$ , в принципе, может быть следствием дисперсии кристаллического электрического поля возбуждений и/или понижения локальной симметрии. По произведенным оценкам понижение кубической локальной симметрии до тетрагональной с отклонением значения  $a/c$  от единицы примерно на  $0.5 \%$  могло бы вызвать расщепление основного состояния  $\Delta E \approx 0.8 \text{ мэВ}$ .

Таким образом, проведенные измерения позволили экспериментально определить волновую функцию основного состояния и подтвердить схему уровней кристаллического электрического поля

4*f*-электронов ионов празеодима в PrB<sub>6</sub>. Кроме того, было показано, что при температурах ниже второго перехода энергия расщепления заметно увеличивается.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-02-08079) и INTAS (грант № 03-51-3036).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. K. N. Lee and R. Bachmann, Phys. Rev. B **2**, 4580 (1970).
2. C. M. McCarthy, C. W. Tompson, R. J. Graves et al., Sol. St. Comm. **36**, 861 (1980).
3. S. Kobayashi, M. Sera, M. Hiroi et al., J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 1721 (2001).
4. M. Sera, Sh. Goto, T. Koshikawa et al., J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 014706 (2006).
5. M. Lowenhaupt and M. Prager, Z. Phys. B **62**, 195 (1986).