

# «Магнитные состояния редкоземельных металлов при высоких давлениях»

## Авторский коллектив:

Денис Козленко<sup>1</sup>, Наталия Голосова<sup>1</sup>, Евгений Лукин<sup>1</sup>, Сергей Кичанов<sup>1</sup>, Борис Савенко<sup>1</sup>, Виктор Юшанхай<sup>2</sup>

<sup>1</sup> – ЛНФ ОИЯИ

<sup>2</sup> – ЛТФ ОИЯИ

[Цикл работ](#) состоит из четырех публикаций.

Соединения редкоземельных металлов являются сильно коррелированными электронными системами, в которых наблюдаются разнообразные физические явления, в том числе – эффект Кондо, валентная нестабильность, нестандартная сверхпроводимость, квантовые критические явления, гигантская магнитострикция, разнообразные магнитные состояния. Косвенные обменные магнитные взаимодействия между локализованными моментами посредством электронов проводимости в сочетании с эффектами кристаллического поля, гибридизации с электронными состояниями внешних электронных оболочек и другими факторами приводят к многообразию магнитных состояний, многие из которых носят несоразмерный характер [1-4].

Наличие нескольких конкурирующих факторов, определяющих поведение физических свойств, приводит к большому разнообразию магнитных состояний редкоземельных металлов, от простых ферромагнитных до сложных несоразмерных модулированных антиферромагнитных фаз. Также они обладают богатым структурным полиморфизмом при изменении высокого давления, однако особенности магнитного упорядочения индуцированных давлением фаз практически не изучены. Большую роль для выявления микроскопических механизмов формирования физических свойств имеют исследования при воздействии высокого давления, поскольку различный отклик конкурирующих факторов при приложении давления позволяет разделить их вклады. В силу высокой сложности проведения нейтронных исследований при воздействии высоких давлений поведение магнитных состояний редкоземельных металлов под давлением и их изменение при структурных фазовых переходах ранее практически не исследовались.

Настоящий цикл работ представляет результаты систематического и детального изучения изменений магнитной и атомной структуры модельных представителей семейства редкоземельных металлов: тербия Tb [1], гадолиния Gd [2], гольмия Ho [3], и тулия Tm [4], методами нейтронной дифракции в широком диапазоне давлений и температур.

В тербии наблюдается структурный фазовый переход из исходной гексагональной плотноупакованной фазы (ГПУ) в ромбоэдрическую фазу структурного типа Sm при высоких давлениях выше 4 ГПа [1]. Данный переход сопровождается магнитным фазовым переходом типа ферромагнетик – антиферромагнетик. Впервые определена магнитная структура ромбоэдрической фазы высокого давления, симметрия которой имеет сложный модулированный АФМ характер и является соразмерной. На основе DFT расчетов

построена теоретическая модель структурного фазового перехода, индуцированного давлением.

В случае сильно поглощающего нейтроны гадолиния исследовался изотопически замещенный образец  $^{160}\text{Gd}$  (содержание изотопа 95 %). В нем уже при нормальных условиях наблюдалось сосуществование гексагональной плотноупакованной и ромбоэдрической фазы [2]. При приложении высоких давлений обнаружено постепенное подавление гексагональной фазы и рост объемной доли ромбоэдрической фазы. Это сопровождается подавлением ферромагнитного упорядочения, формируемого в данной фазе, с барическим коэффициентом  $dT_C/dP = -6.3(1)$  К/ГПа. При высоких давлениях  $P = 9$  ГПа и ниже температуры Нееля  $T_N \sim 100$  К в ромбоэдрической фазе  $^{160}\text{Gd}$  наблюдается соразмерная антиферромагнитная фаза [2], аналогичная обнаруженной в тербии [1].

В гексагональной плотноупакованной фазе тулия Tm при нормальном давлении наблюдается формирование несоразмерного магнитного состояния с продольной синусоидальной модуляцией и вектором распространения  $q = (0, 0, q_z = 0.279)$  при температуре Нееля  $T_N = 52$  К [3]. При дальнейшем охлаждении величина  $q_z$  увеличивается до соразмерного значения  $q_z = 2/7$  при температуре  $T_I = 24$  К. Сформированная соразмерная магнитная структура представляет собой сочетание структурных блоков с сонаправленным упорядочением магнитных моментов тулия внутри блока и меняющих направление на противоположное в соседних блоках вдоль кристаллографической оси  $c$ . Обнаружена высокая чувствительность симметрии магнитной фазы тулия к воздействию высоких давлений. Так, наблюдается изменение компоненты вектора распространения  $q_z$  с  $2/7$  при 0 ГПа до  $q_z = 7/23$  при 2 ГПа с дальнейшим увеличением до  $7/22$  при высоких давлениях 5.5 ГПа [3].

В отличие от тулия, в гольмии Ho при температурах ниже температуры Нееля  $T_N = 127$  К и нормальном давлении наблюдается формирование несоразмерного геликоидального магнитного состояния с вектором распространения  $q = (0, 0, q_z)$ . С понижением температуры до  $T_L = 20$  К наблюдается выраженное уменьшение  $q_z$  от исходного значения 0.270. При  $T_L = 20$  К величина  $q_z$  принимает соразмерное значение  $5/26$  и не изменяется при последующем охлаждении [4]. Ниже температуры  $T_L$  формируется соразмерная коническая магнитная структура. При воздействии высоких давлений обнаружено постепенное подавление низкотемпературной конической магнитной фазы, а выше 4 ГПа наблюдается только геликоидальное магнитное упорядочение. Установлено, что при высоких давлениях температура перехода в состояние с фиксированной компонентой  $q_z$  возрастает до  $T_L = 50$  К (при 8.7 ГПа) с барическим коэффициентом  $dT_L/dP \approx 3.4$  К/ГПа, а значение  $q_z$  увеличивается до  $1/4$ . При этом исходная величина  $T_N$  уменьшается с коэффициентом  $dT_N/dP \approx -2.2$  К/ГПа. На основе полученных данных построена  $P$ - $T$  магнитная фазовая диаграмма гольмия.

Полученные результаты имеют важное значение для формирования современных представлений в области магнетизма переходных металлов и стимулировали дальнейшие исследования в данном направлении международных научных групп в других нейтронных центрах. Представленный цикл работ занял I место на конкурсе научных работ ЛНФ 2023 года в номинации «Физика конденсированного состояния».

### **Список работ цикла:**

1. D. P. Kozlenko, V. Yu. Yushankhai, R. Hayn, M. Richter, N. O. Golosova, S. E. Kichanov, E. V. Lukin, and B. N. Savenko, Pressure-induced structural transition and antiferromagnetism in elemental terbium, *Physical Review Materials* 5, 034402 (2021), DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.034402.
2. N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, E.V. Lukin, S.E. Kichanov, B.N. Savenko, High pressure effects on the crystal and magnetic structure of 160Gd metal, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 540, 168485 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.168485>
3. N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, E.V. Lukin, S.E. Kichanov, B.N. Savenko, Pressure tuning of magnetic states in elemental thulium, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 560, 169662 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169662>
4. N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, E.V. Lukin, S.E. Kichanov, B.N. Savenko, High pressure effects on magnetic states of elemental holmium, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 580, 170971 (2023), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170971>