

# 金属间化合物 $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$ 的磁性能机制\*

罗广圣

曾贻伟

(南昌大学化学与材料科学学院, 南昌 330047) (北京师范大学物理系, 北京 100875)

**摘要** 通过 X 射线衍射, 磁测量和 Mössbauer 谱测定了  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  的结构和磁性. 结果表明,  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ ) 化合物的晶体结构均为  $\text{ThMn}_{12}$  型结构; 随着 Co 含量  $x$  的增大, 晶格常数将单调减少. Co 原子的替代将导致化合物各个 Fe 晶位上的磁超精细场值  $B_{\text{hf}}$  逐渐增加. Co 部分取代  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  中的 Fe 原子时, 将择优占据  $8i$  铁晶位. 取向样品  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  的热磁曲线和变温 Mössbauer 谱研究结果表明, 该化合物在  $T=120\text{ K}$  条件下存在自旋重取向现象.

**关键词**  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$ , 择优占位, 自旋重取向, 饱和磁矩, Mössbauer 谱

**中图分类号** TG132.2

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(2002)03-0326-05

## MAGNETIC PROPERTY MECHANISM OF THE INTER-METALLIC COMPOUNDS $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$

LUO Guangsheng

College of Chemistry and Material Sciences, Nanchang University, Nanchang 330047

ZENG Yiwei

Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875

Correspondent: LUO Guangsheng, associate professor, Tel: (0791)8100305, Fax: (0791)8304102

Supported by Natural Science Foundation of Jiangxi Province (No.150014)

Manuscript received 2001-04-17, in revised form 2001-09-19

**ABSTRACT** The crystal structure and magnetic properties of  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  have been measured by X-ray diffraction, magnetic properties measurements and Mössbauer spectroscopy methods. The following conclusions are obtained: all  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ ) compounds crystallize in  $\text{ThMn}_{12}$ -type structure, the lattice constants decrease monotonically with increasing of Co atom concentration. Substitution of Co for Fe leads to a monotonic increase of the hyperfine interaction field  $B_{\text{hf}}$  on all Fe sites. Furthermore, the experiment results show that Co atom occupies preferentially  $8i$  Fe site in  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  compounds. The experimental results of thermomagnetic curves and Mössbauer spectroscopy at different temperatures indicate that there exists a spin reorientation at  $T=120\text{ K}$  in the oriented sample  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$ .

**KEY WORDS**  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$ , preferential occupation, spin reorientation, saturation atom moment, Mössbauer spectroscopy

最近几年, 新型稀土 (RE) 一过渡族 (T) 金属间化合物永磁材料的探索集中在 1 : 12, 2 : 17 和 3 : 29 型稀土铁基化合物上<sup>[1]</sup>. 在探索新型稀土永磁材料的过程中, 人们发现利用磁性元素 Co, Ni 或非磁性元素 Al, Ga, Si 等替代 1 : 12 型 RE-Fe 化合物中的 Fe, 可以有效提高材料的内禀永磁性能<sup>[2,3]</sup>. 在 1 : 12 型化合物中, 存在三个不等价过渡族晶位:  $8i$ ,  $8j$  和  $8f$ , 它们对

化合物的内禀磁性贡献不同. 选择  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  为研究对象主要基于以下考虑: (1) V 原子为磁中性原子, 没有磁矩, 可以集中研究 RE 与 Fe 之间的相互作用; (2)  $\text{REFe}_{12-x}\text{V}_x$  中, 当  $x=2$  时磁性能最好; (3)  $\text{REFe}_{10}\text{V}_2$  中, 当 RE 为 Nd 时的  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  磁性能较好. 考虑到  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  的 Curie 温度  $T_C$  (570 K) 比  $\text{SmCo}_5$  的  $T_C$  要低, 探讨用 Co 原子部分替代 Fe 原子, 研究替代效应对其结构和磁性能的影响以及 Co 原子的占位情况和自旋重取向等磁性能微观机制有重要意义. 本文报道了通过 X 射线衍射、磁测量和 Mössbauer 谱研究 Co 替代  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  中的 Fe 对化合物结构和磁性能的影响.

\* 江西省自然科学基金资助项目 1500147

收到初稿日期: 2001-04-17, 收到修改稿日期: 2001-09-19

作者简介: 罗广圣, 男, 1970 年生, 副教授, 硕士

## 1 实验方法

纯度超过 99.9% 的 Nd, Fe, Co 和 V 原料, 按分子式配比称量后, 利用电弧炉在高纯 Ar 气保护下熔炼成  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ ) 合金锭子, 每个合金熔炼 3 次以保证均匀, 然后在  $10^{-3}$  Pa 的高真空条件下在 1120 K 退火处理二周, 再随炉冷却至室温。

取向样品的制备方法为: 将退火后的样品粉碎研细后, 用环氧树脂少许调匀后放入模具中, 在 1 T 的强磁场中磁化 8—10 h, 待样品固化后取出即为取向样品。供 Mössbauer 谱测量用的取向样品为半径 7 mm 的圆形薄片, 厚度为 0.5 mm, 磁化方向垂直于薄片所在平面。用日本理学 D/max-rc 型 X 射线衍射仪 (Cu  $K_\alpha$ , 石墨单色器) 对  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ ) 化合物粉末样品进行 X 射线衍射实验。扫描范围  $2\theta$  为  $20^\circ$ — $100^\circ$ 。

用 MS-500 型匀加速透射 Mössbauer 谱仪对  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 进行了室温 290 K 和低温 80 K 条件下的 Mössbauer 谱测量。γ 射线源是  $^{57}\text{Co}/\text{Pd}$  (源强 25mCi)。室温样品为均匀的厚度为  $30 \text{ mg}/\text{cm}^2$  的吸收体; 低温样品为直径 14 mm, 厚度  $30 \mu\text{m}$  的薄片样品。γ 射线方向与薄片样品所在平面的法线方向平行。通过收集室温条件下  $25 \mu\text{m}$  厚的  $\alpha$ -Fe 箔标准吸收体的 Mössbauer 谱来标定速度。低温与室温条件下的所有 Mössbauer 谱数据都是通过 MOSFUN 专用程序根据最小二乘法原理来拟合分析的。拟合的 Mössbauer 谱包络谱是由五套独立的 Fe 晶位的 Lorentz 六线谱以及杂质相的一套双线谱和一套单线谱叠加而成。拟合过程中各个 Fe 晶位及其子晶位的谱线强度比根据子谱分裂情况约束为:  $2 : 1 : 1 : 1 : 1$ , 分别对应  $8i, 8j_1, 8j_2, 8f_1$  和  $8f_2$  子谱强度。拟合时,  $(8j_1, 8j_2), (8f_1, 8f_2)$  两个 Fe 晶位上对应的两个子晶位产生的六线谱分别具有相同的同质异能移 IS 和电四极分裂值 QS, 四套六线谱的宽度限制为相等。每套磁分裂谱的宽度根据 Mössbauer 谱学原理限制为  $F_{1,6} > F_{2,5} > F_{3,4}$ 。

对  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品进行了 90, 120, 160, 200 和 290 K 等不同温度条件下的变温 Mössbauer 谱测

量。不同温度条件下的所有 Mössbauer 谱数据都是通过 MOSFUN 专用程序根据最小二乘法原理来拟合分析的。对  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品同时利用提拉样品磁强计进行了低温条件 ( $T < 200 \text{ K}$ ) 下的热磁曲线 ( $M-T$ ) 测量, 外磁场强度为 0.1 T。

## 2 实验结果与讨论

X 射线衍射实验结果表明, 用 Co 原子部分替代  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  中的 Fe 原子形成  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  化合物, 当 Co 的含量  $x$  为 0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20 时, 所有样品晶体结构均保持  $\text{ThMn}_{12}$  型四方结构不变, 空间群为  $I4/mmm$ 。进一步分析表明, 所有样品除主相  $\text{ThMn}_{12}$  型结构外, 还存在少量顺磁性富 Nd 相和具有 CsCl 结构的杂质相, 杂质相含量小于 5%。

表 1 列出了  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$ ) 粉末样品的晶格常数  $a, c$  和晶胞体积  $V$  等参数。由表 1 可知, Co 原子部分替代 Fe 原子形成  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  化合物, 随着 Co 含量  $x$  的增加, 晶格常数  $a, c$  均呈单调下降趋势, 晶胞体积  $V$  也呈单调下降趋势, 这是因为 Co 原子的半径比 Fe 原子的半径小, Co 原子的替代产生了局域晶格收缩, 从而导致晶胞体积减小。

在  $\text{ThMn}_{12}$  型结构中稀土原子占据一个  $2a$  晶位, 过渡金属原子占据三个结晶学不等效晶位 ( $8i, 8j, 8f$ )。  $\text{ThMn}_{12}$  型结构各个晶位的近邻环境为:  $2a(1, 4, 8, 8), 8i(1, 5, 4, 4), 8j(2, 4, 4, 2), 8f(2, 4, 2, 4)$ , 其中四个指标数表征  $2a, 8i, 8j$  和  $8f$  四个晶位相对不同晶位的最近邻原子数, 这样  $8i$  晶位的 Fe 近邻数最多, 为 13 个, 从而  $8i$  晶位的超精细场  $B_{\text{hf}}$  值最大; 而  $8j, 8f$  两个晶位的子谱总强度以及近邻环境均相近, 但其超精细场  $B_{\text{hf}}$  值通过能带结构计算可判定为:  $B_{\text{hf}}(8j) > B_{\text{hf}}(8f)$ 。因此, 三个不等价铁晶位的超精细场值  $B_{\text{hf}}$  由大到小的顺序为:  $B_{\text{hf}}(8i) > B_{\text{hf}}(8j) > B_{\text{hf}}(8f)$ 。V 原子为磁性原子, V 原子在三个不等价铁晶位上的择优占位, 使得同一铁晶位上的 Fe 原子在不同晶胞中存在不同的近邻环境, 从而构成超精细场的分布。结合考虑偶极场的贡献以及易磁化方向与电场梯度主轴之间夹角不同, 拟合过程中  $8j$  和  $8f$  晶位分别由两套子谱 ( $8j_1, 8j_2$ ), ( $8f_1, 8f_2$ )

表 1  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  化合物的晶格常数  $a, c$  和晶胞体积  $V$   
Table 1 The lattice parameters  $a, c$  and the unit-cell volume  $V$  of the  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  compounds

Composition	$a, \text{nm}$	$c, \text{nm}$	$V, \text{nm}^3$	$\Delta V/V$	Structure
$x=0$	0.8577	0.4796	0.3528	0	$\text{ThMn}_{12}$
$x=0.05$	0.8571	0.4794	0.3522	-0.17%	$\text{ThMn}_{12}$
$x=0.10$	0.8561	0.4790	0.3511	-0.48%	$\text{ThMn}_{12}$
$x=0.15$	0.8554	0.4786	0.3502	-0.74%	$\text{ThMn}_{12}$
$x=0.20$	0.8549	0.4784	0.3496	-0.91%	$\text{ThMn}_{12}$

构成,  $8i$  晶位用一套六线谱拟合,  $8j_1, 8j_2$  为  $8j$  晶位的两个子晶位,  $8f_1, 8f_2$  为  $8f$  晶位的两个子晶位, 这样用五套六线谱拟合. 另外, 考虑到杂质相的存在, 增加一套双线谱 (顺磁性富 Nd 相) 及一套单线谱 (CsCl 结构 FeV 相, 对称性程度很高, 电四极分裂值 QS 可视作零) 参加拟合. 拟合时,  $(8j_1, 8j_2), (8f_1, 8f_2)$  两个晶位上对应两个子晶位产生的六线谱分别具有相同的 IS, QS 值, 强度比均约束为 1 : 1, 四套六线谱的宽度限制为相等. 对  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 三个粉末样品在室温 290 K 和低温 80 K 两种温度条件下的 Mössbauer 谱进行了拟合. 低温与室温两种条件下拟合方法一样.  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 的室温 290 K 和低温 80 K 的 Mössbauer 谱以及拟合结果分别示于图 1 和表 2 (表 2 中的 IS 为相对于室温条件下  $\alpha\text{-Fe}$  的同质异能移).

由表 2 可知, 室温 290 K 的各个 Fe 晶位的同质异能移 IS 均比低温 80 K 的值小. 这一实验现象是由于二次 Doppler 能移对同质异能移的贡献. 从表 2 中不同 Fe 晶位的同质异能移 IS 值可知, 随着 Co 含量  $x$  的增加, 同质异能移 IS 整体没有出现规律性的变化. 这一现象是由于掺入 Co 原子后, 晶格常数减小, 电子密度增大, 导致同质异能移 IS 减小; 同时, Co 原子掺入之后成为 Fe 原子的近邻, 使 Fe 原子成为 3d 电子的接受者, 从而对 s 电子的屏蔽作用增大, 促使同质异能移 IS 增加. 这两方面效应综合起来使 IS 呈现无规律性变化. 需要指出的是, 在  $T=290\text{ K}$  时,  $8i$  铁晶位的 IS 随 Co 含量  $x$  的增加而呈单调减小趋势; 而在  $T=80\text{ K}$  时,  $8i$  铁晶位的 IS 呈无规律性变化, 这表明在低温 80 K 下热运动效应比择优占位效应更强.

从表 2 可以看出, 低温 80 K 和室温 290 K 两种温度条件下的电四极分裂值 QS 均较小, 且接近于零, 这一

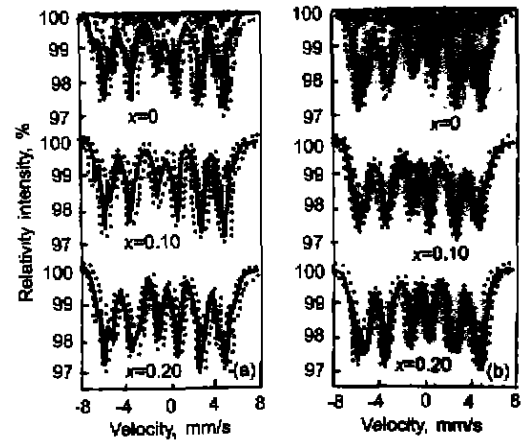


图 1  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 化合物的室温 290 K 和低温 80 K 的 Mössbauer 谱图  
Fig.1 Mössbauer spectra of the compounds  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) at room temperature 290 K (a) and low temperature 80 K (b)

实验现象表明不同铁晶位上 Fe 原子核的周围环境均具有较高的对称性, 且与温度关系不大. 但是,  $T=290\text{ K}$  和  $T=80\text{ K}$  条件下的  $8i$  铁晶位上的电四极分裂 QS 值却较大, 并有突变,  $x=0.10$  和  $0.20$  的 QS 值相对于  $x=0$  的 QS 值有突变, 且变化的绝对值较大, 分别约为 0.23 和 0.13 mm/s, 并且随着 Co 含量  $x$  的增大, 电四极分裂 QS 绝对值呈单调增加趋势. 这一结果表明, Co 原子部分替代  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  化合物中 Fe 原子, 将择优占据  $8i$  铁晶位.

忽略各个 Fe 晶位上的无反冲因子之间的差异, 各套谱线的面积比等于各个 Fe 晶位上的 Fe 原子数之比. 据此可推算出 Fe 原子在各个 Fe 晶位上的分布情况, 从而可推知 Co 原子的占位情况. 由表 2 可知,  $T=290\text{ K}$  和

表 2  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 化合物在室温 290 K 和低温 80 K 条件下的 Mössbauer 谱拟合结果  
Table 2 Fitting results of Mössbauer spectra of the  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  compounds at room temperature 290 K and low temperature 80 K

Co content $x$	Site $8i$				Site $8j$				Site $8f$			
	IS mm/s	QS mm/s	$B_{\text{hf}}$ T	%	IS mm/s	QS mm/s	$B_{\text{hf}}$ T	%	IS mm/s	QS mm/s	$B_{\text{hf}}$ T	%
290K												
0	-0.080	0.042	25.55	22.0	-0.16	-0.041	21.09	39.9	-0.15	-0.14	17.65	38.2
0.10	-0.14	-0.19	26.54	15.4	-0.15	-0.0047	22.18	41.7	-0.20	-0.017	18.06	42.8
0.20	-0.23	-0.20	27.87	10.4	-0.17	-0.043	22.46	43.9	-0.19	-0.0034	18.06	45.7
80 K												
0	-0.030	-0.0020	27.30	22.7	-0.030	-0.017	23.85	41.2	-0.11	-0.031	19.66	36.1
0.10	0.050	-0.13	28.89	15.7	0.050	-0.040	24.07	39.2	-0.050	-0.042	19.69	45.1
0.20	-0.010	-0.21	29.39	8.3	-0.050	-0.0050	24.85	42.9	-0.070	0.020	20.20	48.8

$T=80\text{ K}$  两种温度条件下的  $8i$  铁晶位上的 Fe 原子数比  $8j$  和  $8f$  铁晶位上的 Fe 原子数均小得多, 约小 50%, 而  $8j$  铁晶位和  $8f$  铁晶位上的 Fe 原子数近似相同。并且随着 Co 含量  $x$  的增大  $8i$  铁晶位上的 Fe 原子数不断减小,  $8f$  Fe 晶位和  $8j$  Fe 晶位上的 Fe 原子数却不断增加。这一实验结果形象地表明, 掺入 Co 原子后, Co 原子将择优占据  $8i$  Fe 晶位, 并造成 Fe 原子的重迁移分布。

由表 2 中不同 Fe 晶位的内磁场  $B_{\text{hf}}$  值可知,  $T=290\text{ K}$  和  $T=80\text{ K}$  两种条件下各个 Fe 晶位上的磁超精细场  $B_{\text{hf}}$  随着 Co 含量  $x$  的增大而不断增大, 这一实验事实可用 Slater-Pauling 曲线<sup>[4]</sup> 解释。随着 Co 原子作为 Fe 原子近邻的原子数的增加, 自旋向上的 3d 带中空穴数不断减少, 而自旋向下的 3d 带中空穴数则不断增加, 这样合金的总磁矩将增大, 因而磁超精细场  $B_{\text{hf}}$  随 Co 含量  $x$  增大而不断增加。另外,  $T=290\text{ K}$  和  $T=80\text{ K}$  下  $8j$  和  $8f$  Fe 晶位上的  $B_{\text{hf}}$  值随  $x$  的变化不大, 而  $8i$  Fe 晶位上的  $B_{\text{hf}}$  值随  $x$  的增大而不断增加, 且增加的幅度较大, 这表明 Co 原子将择优占据  $8i$  Fe 晶位。由表 2 还可知,  $T=290\text{ K}$  下各个 Fe 晶位的  $B_{\text{hf}}$  值比  $T=80\text{ K}$  下的值要小, 这是由于自发磁化强度随温度升高而逐渐衰减的缘故。

根据关系式:  $B_{\text{hf}} = A_i \mu_i$ , 可以求出各个 Fe 晶位上的局域原子磁矩, 总的平均原子磁矩以及总的饱和原子磁矩<sup>[5]</sup>。比例因子  $A_i$  只与晶体结构有关, 对不同 Fe 晶位以及不同温度条件下则近似相同。在  $\text{ThMn}_{12}$  型结构中,  $A_i$  可选取为  $14.5\text{ T}/\mu\text{B}$ 。由此可以推算出, 在低温  $80\text{ K}$  条件下,  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 化合物三个不等价 Fe 晶位  $8i, 8j$  和  $8f$  的局域原子磁矩及总的平均原子磁矩分别为:  $1.88, 1.64, 1.36, 1.63\ \mu\text{B}$  ( $x=0$ );  $1.99, 1.66, 1.36, 1.67\ \mu\text{B}$  ( $x=0.10$ );  $2.03, 1.71, 1.39, 1.71\ \mu\text{B}$  ( $x=0.20$ )。这样进一步可推出  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 化合物总的饱和原子磁矩分别为:  $1.65, 1.70, 1.75\ \mu\text{B}$ 。另外,  $T=290\text{ K}$  和  $T=80\text{ K}$  下  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  ( $x=0, 0.10, 0.20$ ) 总的平均磁超精细场值  $B_{\text{hfa}}$  可分别推算为:  $21.43, 22.26, 22.80\text{ T}$  ( $T=290\text{ K}$ ),  $23.60, 24.22, 24.81\text{ T}$  ( $T=80\text{ K}$ )。

在拟合  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品的变温 Mössbauer 谱时, 过渡金属原子占据的三个不等价晶位  $8i, 8j, 8f$  各只用一套六线谱拟合, 再加上一套双线谱 (顺磁性富 Nd 相) 及一套单线谱 (CsCl 结构 FeV 相, 对称性程度很高, 电四极分裂值 QS 可视为零) 参加拟合, 并且要求三套六线谱的二、五线强度放开拟合, 而其宽度限制为相等。图 2 为  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品在  $90, 120, 160$  和  $200\text{ K}$  等不同温度下的变温 Mössbauer 谱图。

对取向样品  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  在  $90, 120, 160, 200, 290\text{ K}$

等不同温度条件下的平均夹角  $\theta_{\text{av}}$  进行了计算, 计算结果分别为  $90^\circ, 85^\circ, 52^\circ, 8^\circ, 0^\circ$ 。由平均夹角  $\theta_{\text{av}}$  与温度的关系可知,  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物在室温下呈现易  $c$  轴各向异性, 随着温度的逐渐降低, 平均夹角  $\theta_{\text{av}}$  逐渐增加, 这表明  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物易磁化方向逐渐偏离  $c$  轴, 在温度下降到  $120\text{ K}$  时发生自旋重取向现象, 即其磁结构由易  $c$  轴各向异性转至易  $c$  平面各向异性<sup>[6]</sup>。  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品的低温热磁曲线 ( $M-T$ ) 示于图 3。由图 3 可明显看出  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物在  $T=120\text{ K}$  温度下发生自旋重取向现象, 与 Mössbauer 谱结果吻合得很好。

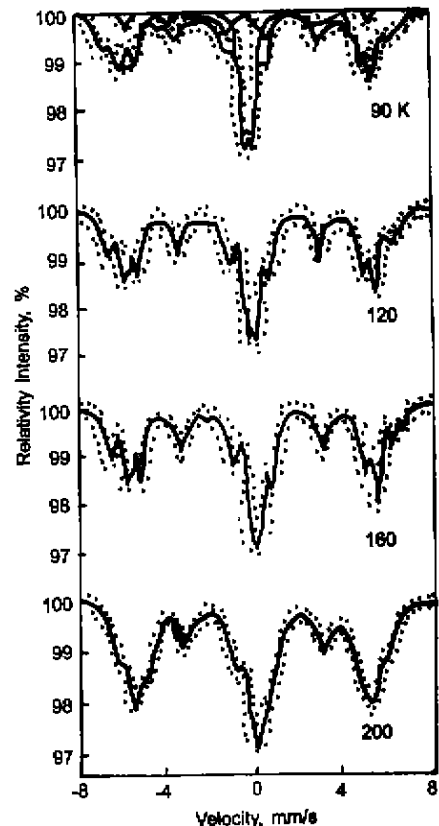


图 2  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品的变温 Mössbauer 谱图

Fig. 2 Mössbauer spectra of the oriented sample  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  at different temperatures

在室温下,  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物呈现易  $c$  轴各向异性, 而在  $T=120\text{ K}$  下其磁结构变至易  $c$  平面各向异性。这一实验现象表明,  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物具有较强的室温单轴各向异性。在  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物中, 稀土 Nd 原子占据一个  $2a$  晶位, 过渡金属 Fe 原子占据三个结晶学不等价晶位  $8i, 8j, 8f$ , 磁中性 V 原子在三个不等价铁晶位上择优占位, 导致 Fe 亚晶格单轴各向异性增强, 从而  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物在室温下具有较强的单轴各向异性。Co 替代  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物中的 Fe 原子, Co 择优占据  $8i$  晶位, 呈现面各向异性, 随着 Co 原子含量的增加, Fe-Co 亚晶格的单轴各向异性将减弱, 导致  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$

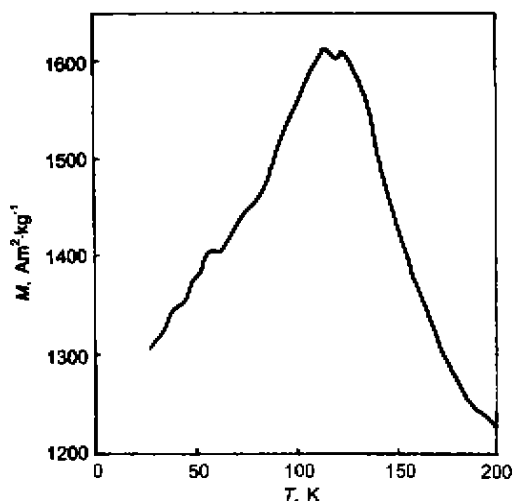


图3  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  取向样品的热磁曲线

Fig.3  $M-T$  curve of the oriented sample  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$

化合物的易  $c$  轴各向异性减弱. 这样  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  化合物的自旋重取向温度  $T_{sr}$  将在 120 K 温度以下逐渐减小.  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物具有最高的自旋重取向温度 [7].

### 3 结论

通过对金属间化合物  $\text{Nd}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{10}\text{V}_2$  的磁性能机

制进行研究, 可得出以下结论:

(1) Co 原子的替代, 导致晶格常数的减小和各个 Fe 晶位磁超精细场的增加, 但仍保持  $\text{ThMn}_{12}$  型晶体结构不变.

(2) Co 原子择优占据  $8i$  Fe 晶位, 使得化合物的磁结构发生变化.

(3)  $\text{NdFe}_{10}\text{V}_2$  化合物在  $T=120$  K 温度下存在自旋重取向现象.

### 参考文献

- [1] Han X F, Yang F M, Zhu J J, Pan H G, Wang Y G, Wang J L, Tang N, Zhao R W. *J Appl Phys*, 1997; 81: 3248
- [2] Wang J L, Tang N, Bruck E, Zhao R W, Yang F M, de Boer F R. *J Appl Phys*, 1997; 81: 5131
- [3] Shen B G, Cheng Z H, Liang B, Guo H Q, Zhang J X, Gong H Y, Wang F W, Yan Q W, Zhan W S. *Appl Phys Lett*, 1995; 67: 1621
- [4] Yang Y C, Sun H, Zhang Z Y, Shen B G, Hu B P, de Boer F R. *Sol Stat Commun*, 1988; 68: 175
- [5] Shiga M, Nakamura Y. *J Phys Soc Jpn*, 1976; 40: 1295
- [6] Wang J L, Tang N, Yang D, Yang F M, de Boer F R. *Acta Phys Sin*, 1999; 48(suppl): 74
- [7] Wang Y Z, Hu B P, Song L, Sheng B G. *J Phys Condens Matter*, 1999; 6: 7085