

**50-я научная конференция МФТИ**  
**Факультет проблем физики и энергетики**  
**Секция квантовой оптики**

---

УДК 535.34

*Станиславчук Т.Н.*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

**Кристаллическое поле и магнитные свойства**  
 **$\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$**

Бораты  $\text{RM}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $\text{R} = \text{Y}$  или редкоземельный ион,  $\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Sc}, \text{Cr}, \text{Fe}$ ) имеют структуру природного минерала хантита, которая не обладает инверсной симметрией. Аллюминаты  $\text{Nd}_x(\text{Y}, \text{Gd})_{1-x}\text{Al}_3(\text{BO}_3)_4$  из этого семейства используются в качестве нелинейной среды в лазерах с самоудвоением и самосмещением частот и были хорошо изучены за последние десятилетия. Ферробораты со структурой хантита также были получены многим ранее [1], но только недавние улучшения в технологии роста кристаллов открыли возможности для тщательного изучения их физических свойств. К настоящему времени наиболее хорошо исследованным кристаллом ферроборатов является  $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ , для которого, в частности, была продемонстрирована возможность контроля диэлектрической поляризации внешним магнитным полем [2, 3]. Подобная недавняя работа по  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  показала, что это соединение обладает значительно большей, по сравнению с  $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ , зависимостью электрической поляризации от магнитного поля и гигантским квадратичным магнитоэлектрическим эффектом [4] и, следовательно, может использоваться для практических применений. Главное отличие между этими двумя соединениями состоит в том, что ион  $\text{Gd}^{3+}$  имеет нулевой орбитальный момент,  $L = 0$ , в основном состоянии ( ${}^8S_{7/2}$  которое отделено на  $32000 \text{ см}^{-1}$  от первого возбужденного состояния) и, следовательно, в первом приближении не подвергается влиянию кристаллического поля (КП), в то время как основное состояние  $\text{Nd}^{3+}$  иона в  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( ${}^4I_{9/2}$ ,  $L = 6$ ,  $S = 3/2$ ,  $J = 9/2$ ) расщепляется КП на пять Крамерсовых дублетов.

Чтобы учесть количественно эффекты КП, было проведено широкодиапазонное исследование поляризованных спектров поглощения f-f переходов в ионе  $\text{Nd}^{3+}$  в  $\text{NdFe}_3(\text{BO}_3)_4$  [5]. Анализ поляризационных спектров при различных температурах позволил определить энергии и в некоторых случаях представления и обменные расщепления 84 Крамерсовых дублетов  $\text{Nd}^{3+}$  иона. В рамках модели обменных зарядов нашим соавтором по работе [5] Б.З. Малкиным был выполнен расчёт по теории КП, получен набор из шести действительных параметров КП и вычислены волновые функции и магнитные  $g$ -факторы. В частности, для основного состояния иона  $\text{Nd}^{3+}$   $g_{\perp} = 2,385$  и  $g_{\parallel} = 1,376$ . Используя экспериментально измеренное расщепление

основного состояния иона  $\text{Nd}^{3+}$   $\Delta = 8,8 \text{ см}^{-1}$ , были вычислены величины эффективного магнитного поля  $B_{loc} = 7,88 \text{ Тл}$  в месте нахождения  $\text{Nd}^{3+}$  иона и обменного интеграла  $\text{Nd-Fe}$   $|J_{FN}| = 0,48 \text{ К}$ . Для проверки достоверности полученного набора параметров КП были промоделированы данные о магнитной восприимчивости. В качестве рабочей использовалась модель димера, состоящего из двух ближайших ионов железа в спиральной цепочке, что частично учитывало квазиодномерность свойств ферроборатов. Дальнейшие вычисления проводились в рамках приближения среднего поля. Результаты вычислений с обменными параметрами для ионов  $\text{Fe}^{3+}$   $J_{nn} = -6,25 \text{ К}$  (внутрицепочечное взаимодействие) и  $J_{nnn} = -1,92 \text{ К}$  (межцепочечное взаимодействие), полученными при подгонке, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Работа поддержана грантами РФФИ № 07-02-01185 и РАН (по программам фундаментальных исследований).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Joubert C., White W.B., Roy R.* // J. Appl. Crystallogr. — 1968. — 1, 318.
  2. *Zvezdin A.K., Krotov S.S., Kadomtseva A.M., Vorob'ev G.P., Popov Y.F., Pyatakov A.P., Bezmaternykh L.N., Popova E.A.* // JETP Lett. — 2005. — 81, 272.
  3. *Yen F., Lorenz B., Sun Y.Y., Chu C.W., Bezmaternykh L.N., Vasiliev A.N.* // Phys. Rev. B. — 2006. — 73, 054435.
  4. *Zvezdin A.K., Vorob'ev G.P., Kadomtseva A.M., Popov Yu.F., Pyatakov A.P., Bezmaternykh L.N., Kuvardin A.V., Popova E.A.* // JEPT Lett. — 2006. — 83, 509.
  5. *Popova M.N., Chukalina E.P., Stanislavchuk T.N., Malkin B.Z., Antic-Fidancev E., Bezmaternykh L.N.* // Phys. Rev. B. — 2007. — 75, 224435.
- 

Представленная выше версия доклада является ознакомительной.

Версию доклада, предназначенную для печати,  
можно найти в факультетском сборнике трудов конференции.  
Электронные материалы конференции публикуются по адресу  
[http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen\\_sections/](http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/)