

УДК 539.2

ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГИИ ПОВЕРХНОСТНОЙ АНИЗОТРОПИИ БОРАТА ЖЕЛЕЗА FeVO_3 ОТ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ ГРАНИ

Максимова Е.М.¹, Наухацкий И.А.¹, Стругацкий М.Б.¹,
Ягунов С.В.¹, Зубов В.Е.²

¹Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

²Московский Государственный Университет, Москва, Россия

E-mail: solidstat@crimea.edu

Для монокристаллов бората железа, FeVO_3 , получена и проанализирована зависимость величины энергии поверхностной анизотропии от кристаллографической ориентации грани. Показано существование магнитных ориентационных фазовых переходов по углу ориентации грани, приводящих к смене знака поверхностной энергии и переориентации легкой оси.

Ключевые слова: борат железа, слабый ферромагнетик, поверхностный магнетизм.

ВВЕДЕНИЕ

Монокристаллы бората железа, FeVO_3 (группа симметрии $R\bar{3}c$), относятся к ромбоэдрическим слабым ферромагнетикам. В тонком приповерхностном слое кристалла из-за изменения симметрии окружения приповерхностных ионов железа изменяются его магнитные свойства [1,2]. Магнитная анизотропия в приповерхностной области существенно отличается от анизотропии в объеме кристалла. Тем не менее, в обычных ферромагнетиках поверхностная анизотропия, как правило, подавляется из-за больших величин объемной анизотропии и размагничивающих полей. Однако оба этих фактора являются незначительными в ромбоэдрических слабых ферромагнетиках с магнитной анизотропией типа легкая плоскость, к которым принадлежат такие кристаллы как борат железа и гематит.

В работе анализируется зависимость энергии поверхностной анизотропии бората железа от кристаллографической ориентации граней.

1. МОРФОЛОГИЯ ИЗОМЕТРИЧНЫХ ОБРАЗЦОВ КРИСТАЛЛОВ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

Синтезированные из газовой фазы кристаллы бората железа по внешнему виду можно условно разделить на три большие группы: ромбоэдрические, пирамидально-призматические и таблеточные [1], рис.1.

Кристаллы первой группы имеют форму ромбоэдра с гранями простой формы $\{01\bar{1}2\}$ в гексагональной системе координат. Индексы трех верхних граней $(01\bar{1}2)$, $(1\bar{1}02)$ и $(\bar{1}012)$ получаются циклической перестановкой первых трех индексов. Индексы нижних граней получаются из индексов верхних одновременной заменой знаков всех индексов на противоположные.

Угол между соседними ребрами этих граней, сходящимися к оси третьего порядка в вершине ромбоэдра, равен $79,92^\circ$. Наряду с гранями простой формы $\{01\bar{1}2\}$ кристаллы этой группы имеют грани простой формы $\{0001\}$ (базисный пинакоид).



Рис. 1. Кристаллы FeVO_3 ромбоэдрической, пирамидально-призматической и таблеточной форм.

Ребра «прямого» ромбоэдра (реберная форма $\langle 11\bar{3} \rangle$ в ромбоэдрической системе координат), сходящиеся к его вершинам, у таких кристаллов всегда срезаны в большей или меньшей степени гранями ромбоэдра простой формы $\{01\bar{1}4\}$, рис.2.

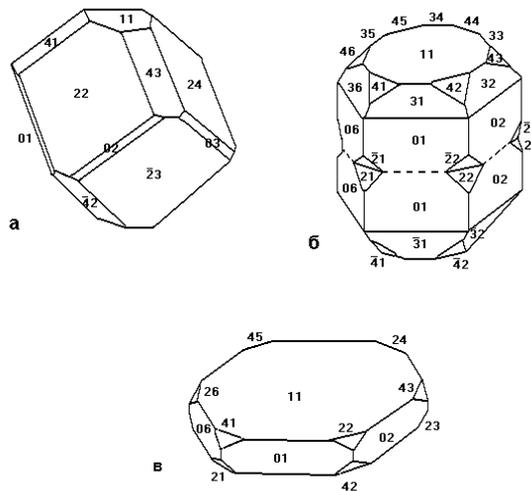


Рис. 2. Модели внешней формы кристаллов трех групп: ромбоэдрической (а), пирамидально-призматической (б) и таблеточной (в).

Примечательной особенностью граней «обратного» (повернутого относительно «прямого» вокруг оси Z_z на 60°) ромбоэдра является их прямоугольная форма, поскольку при пересечении этих граней с гранями основного ромбоэдра и базисного пинакоида образуются взаимно ортогональные ребра, рис.2. Эта особенность граней позволяет визуально выделять их среди остальных и идентифицировать грани перечисленных трех простых форм.

Кристаллы таблеточной группы имеют вид шестигранной призмы с малым расстоянием между основаниями, рис.1, рис.2. Верхние и нижние углы этой призмы по периметру обеих базисных граней притуплены гранями «прямого» и «обратного» ромбоэдров.

Каждая из упомянутых простых форм имеет свое значение индекса l (0, 1, 2, 3 и 4). Поэтому для краткости обозначим всю форму индексом l . Тогда номер грани будет состоять из двух чисел lm , рис.2. Здесь m – порядковый номер грани с заданным l при обходе вокруг оси третьего порядка.

2. РАСЧЕТ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГИИ ПОВЕРХНОСТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ОТ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ ГРАНИ

Из-за особенностей своей кристалломагнитной структуры борат железа является идеальным модельным объектом для изучения поверхностного магнетизма.

Симметрия и величина энергии возникающей одноосной поверхностной анизотропии кристалла определяются типом поверхности, так как эта энергия в соответствии со своим определением зависит от характера и симметрии расположения атомов в приповерхностной области. В частности, исходя из симметричных соображений, можно заключить, что в случае базисной плоскости (0001) одноосная поверхностная анизотропия должна отсутствовать.

Среди всех существующих естественных небазисных граней $(10\bar{1}4)$, $(11\bar{2}0)$, $(11\bar{2}3)$, $(01\bar{1}2)$ монокристалла бората железа максимальная константа поверхностной анизотропии наблюдается на грани $(10\bar{1}4)$: $a_s = 0.014$ эрг/см² [2,3].

Представляет интерес систематизированное изучение зависимости величины энергии поверхностной анизотропии от кристаллографической ориентации граней кристалла, включая гипотетические, которые в процессе роста не формируются. Такие грани можно получать искусственно, путем соответствующих срезов, рис.3.

Рассмотрим семейство граней, параллельных оси второго порядка кристалла. Для таких граней энергия поверхностной анизотропии, определяемая как разность энергий магнитных ионов на поверхности и в глубине кристалла, имеет вид

$$\sigma = a_s \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + b_s \cos^2 \theta + \sin \theta \cos \theta (c_s \cos \varphi + d_s \sin \varphi). \quad (1)$$

Здесь θ и φ – полярный и азимутальный углы антиферромагнитного вектора, отсчитываемые от осей третьего и второго порядков кристалла, соответственно.

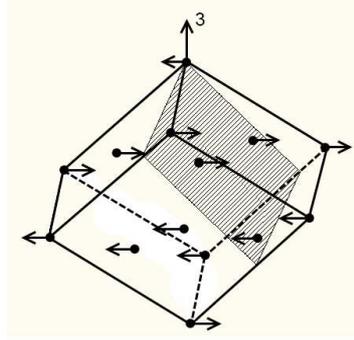


Рис. 3. Схема формирования срезов (штрихованная плоскость), параллельных оси второго порядка кристалла.

В соответствии со своим определением энергия (1) не содержит вклада, связанного энергией легкоплоскостной анизотропии в объеме кристалла. Учет этой анизотропии должен привести к существованию приповерхностного переходного слоя типа доменной границы, в котором магнитные моменты разворачиваются от равновесной ориентации на поверхности к ориентации, параллельной базисной плоскости в объеме кристалла. При этом плавность разворота определяется величиной обменного взаимодействия. Таким образом, переходный слой обладает энергией, которая вместе с энергией поверхностной анизотропии определяет равновесные углы спинов на поверхности грани. В случае пренебрежения очень слабой базисной анизотропией в глубине кристалла переходный слой связан с изменением только угла θ . Поверхностная плотность энергии переходного слоя определяется так [3]:

$$\gamma_{\theta} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \left\{ A \left(\frac{d\theta'}{dS} \right)^2 + a \cos^2 \theta' \right\} dS = \sqrt{aA} (1 - \sin \theta), \quad (2)$$

где A – параметр неоднородного обмена; a – константа легкоплоскостной кристаллографической анизотропии в объеме; θ' и θ – полярные углы антиферромагнитного вектора в объеме и на поверхности кристалла, соответственно.

Характерная энергия переходного слоя в рассматриваемом случае намного превосходит константы поверхностной анизотропии: $\sqrt{a'A} \approx 1,8 \text{ эрг/см}^3 \gg a_s, b_s, c_s, d_s$ [3]. Поскольку выход магнитных моментов приповерхностных ионов Fe^{3+} из базисной плоскости ведет к возрастанию «большой» энергии γ_{θ} и уменьшению «малой» σ , неколлинеарность магнитных моментов в переходном слое является энергетически невыгодной: магнитные моменты оказываются практически в базисной плоскости: $\theta'(S) = \theta = \pi/2$. Поверхностная анизотропия и обменное взаимодействие закрепляют спины в приповерхностном слое вдоль некоторого направления в базисной плоскости, задаваемого ориентацией поверхностных

спинов φ . В этом случае выражение для энергии поверхностной анизотропии (1) существенно упрощается. Константа a_s полностью определяет эту энергию:

$$\sigma = a_s \cos^2 \varphi \quad (3)$$

Мы рассчитали в магнитодипольном приближении константы a_s для граней, параллельных оси второго порядка, различающихся углом α , образуемым гранью с базисной плоскостью. Расчет привел к кривой $a_s(\alpha)$, представленной на рис.4.

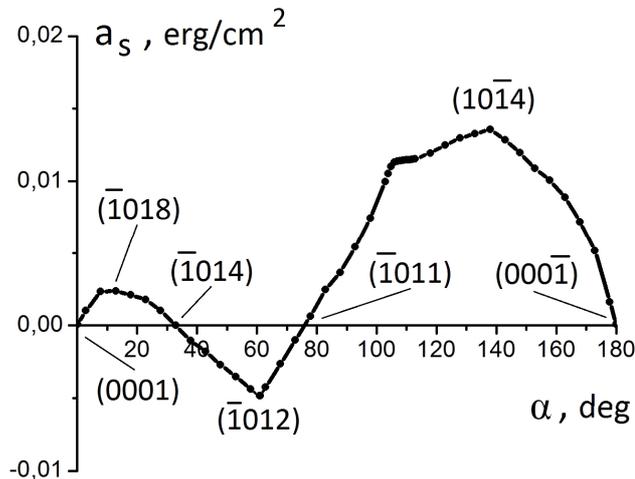


Рис. 4. Угловая зависимость константы поверхностной анизотропии. α – угол, образуемый рассматриваемой гранью с базисной плоскостью.

Кривая $a_s(\alpha)$ имеет ряд экстремумов, крупнейший из которых относится к плоскости $(10\bar{1}4)$. Точки ориентационных фазовых переходов по углу α соответствуют плоскостям $(\bar{1}014)$ и $(\bar{1}011)$. При прохождении через эти точки меняется знак энергии поверхностной анизотропии и ориентация легкой оси.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлена угловая зависимость величины энергии поверхностной анизотропии в кристаллах бората железа для семейства плоскостей, параллельных оси второго порядка. Эта зависимость носит осцилляционный характер. Для рассматриваемого семейства плоскостей максимальная поверхностная энергия соответствует естественной грани $(10\bar{1}4)$.

Список литературы

1. Газотранспортный синтез и морфология изометричных монокристаллов бората железа / Панкратов А.К., Стругацкий М.Б., Ягупов С.В. // Ученые записки Таврического Национального Университета. – 2007. – Т.20(59). №1. – С. 64-73.

2. Near-Surface Magnetic Structures in Iron Borate / Zubov V.E., Krinchik G.S., Seleznyov V.N., Strugatsky M.B. // JMMM. – 1990. – Vol.86. – P.105-114.
3. Surface magnetism of real iron borate monocrystal / Maksimova E.M., Nauhatsky I.A., Strugatsky M.B., Zubov V.E. // JMMM. – 2010. – Vol.322. – P. 477-480.

Максимова О.М. Залежність енергії поверхневої анізотропії бората заліза FeBO_3 від кристаллографічної орієнтації зрізів / Максимова О.М., Наухацький І.А., Стругацький М.Б., Zubov V.E. // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2011. – Т. 24(63), №2. – С. 163-168.

Для монокристалів борату заліза отримана і проаналізована орієнтаційна залежність величини енергії поверхневої анізотропії для різних кристаллографічних орієнтацій зразків. Показано існування орієнтаційних фазових переходів, що призводять до зміни знака поверхневої енергії та переорієнтації легкої осі.

Ключові слова: борат заліза, слабкий ферромагнетик, поверхневий магнетизм.

Maksimova E.M. Dependence of surface anisotropy of iron borate FeBO_3 on the face crystallographic orientation / Maksimova E.M., Nauhatsky I.A., Strugatsky M.B., Zubov V.E. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2011 – Vol. 24(63), No.2 – P. 163-168.

For single crystals of iron borate FeBO_3 , it was obtained and analyzed the orientation dependence of surface anisotropy energy for different crystallographic orientations of the crystal face. It was shown that the existence of orientational phase transitions on the angle of face orientation leads to change in the sign of the surface energy and to reorientation of the easy axis.

Keywords: iron borate, weak ferromagnet, surface magnetism.

Поступила в редакцію 14.09.2011 г.