

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ СВЕРХТОНКОГО ПОЛЯ НА ЯДРЕ ИОНА $^{57}\text{Fe}^{2+}$ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ CoCO_3

М.А.Иванов, В.М.Локтев, Ю.Г.Погорелов

Показано, что сверхтонкое поле $H_{\text{СТ}}$ на ядре иона $^{57}\text{Fe}^{2+}$ в CoCO_3 аномально мало и сильно возрастает во внешнем поле, снимающем редукцию электронного спина. Исследованы особенности температурного поведения $H_{\text{СТ}}$ и коэффициента усиления ЯМР.

Примесный ион Fe^{2+} в антиферромагнетике типа „легкая плоскость” CoCO_3 обладает рядом необычных свойств, прежде всего низкой частотой собственного возбуждения $\omega_0 \approx 1,5 \text{ см}^{-1}$ ^{1,2}. В³ было показано, что особенности этого примесного центра обусловлены орбитальным вырождением основного состояния иона Fe^{2+} в кристаллическом поле CoCO_3 . При этом проекция примесного спина на базисную плоскость оказывается аномально малой, т.е. он „почти ортогонален” вектору антиферромагнетизма l матрицы. Ниже будет показано, что для таких примесей ортогонального типа характерно и необычное поведение сверхтонкого поля на ядре примеси $H_{\text{СТ}}$, а следовательно частоты ЯМР ω_n , мессбауэровского расщепления и т.д. В частности, величина $H_{\text{СТ}}$ оказывается аномально низкой и может сильно меняться в слабом внешнем магнитном поле. В то же время, несмотря на малость величины ω_n , коэффициент усиления ЯМР η аномально велик. Кроме того, температурные зависимости ω_n , η отличаются от стандартных бриллюэновских.

С учетом конкретной электронной структуры иона выражение для $H_{\text{СТ}}$ на ядре ^{57}Fe можно записать в виде^{4,5}:

$$H_{\text{СТ}} = \frac{1}{2} H_c S - 2\mu_B \langle r^{-3} \rangle \left[L - \frac{l(l+1)S - 3(S \cdot L)L}{2(2l+3)(2l-1)} \right], \quad (1)$$

где H_c — контактное поле, S — спин $3d^6$ оболочки ($S=2$), $l=2$, L — приведенный орбитальный момент Fe^{2+} в кубическом поле ($L=1$). В силу соотношения между параметрами тригонального поля лигандов CO_3^{2-} $\xi = 1500 \text{ см}^{-1}$ и спин-орбитального взаимодействия $\lambda = 105 \text{ см}^{-1}$ для Fe^{2+} ⁶ можно ограничиться нижайшим спин-орбитальным дублетом ($S^z = \pm 2$, $L^z = \mp 1$), расщепленным в обменном поле J_s (s — средний спин матрицы) на величину $\omega_0 = 12J^2s^2/\xi$ ³. В этом базисе, разлагая по малым параметрам λ/ξ , J_s/λ , получим:

$$S^z = (4 - O(J^2s^2/\lambda^2)) \sigma^x, \quad L^z = - (2 - O(J^2s^2/\lambda^2)) \sigma^x,$$

$$S^x = 2J_s \left(\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\xi} \right) + \frac{2\omega_0}{J_s} \sigma^z, \quad L^x = - \left(\frac{9J_s\lambda}{\xi^2} + \frac{3\lambda^2}{2\xi^2} \right) - \left[4 \left(\frac{J_s}{\xi} + \frac{J_s\lambda}{\xi^2} \right) + \frac{3\lambda^2}{\xi^2} \right] \sigma^z, \quad (2)$$

где σ^i – матрицы Паули, $e_z \parallel C_3$, $e_x \parallel 1$. В результате (1) принимает вид

$$H_{\text{ст}} = (H_{1x} + 2H_{2x}\sigma^z) e_x + 2H_z \sigma^x e_z. \quad (3)$$

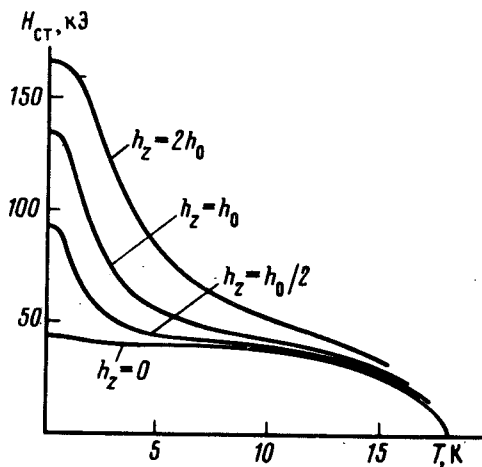
Используя для определенности значения $H_c = -500$ кЭ, $\langle r^{-3} \rangle = 4,78$ а.е., обеспечивающие наблюдаемое значение $H_{\text{ст}} = 184$ кЭ в FeCO_3^s , получим: $H_z \approx 180$ кЭ, $H_{1x} \approx -39$ кЭ, $H_{2x} \approx -4$ кЭ. Если среднее время релаксации электронного перехода $\tau \ll \omega_n^{-1}$, то сверхтонкое расщепление определяется величиной

$$H_{\text{ст}} = |\langle H_{\text{ст}} \rangle| = [(H_{1x} + 2H_{2x}\langle \sigma^z \rangle)^2 + 4H_z^2 \langle \sigma^x \rangle^2]^{1/2}.$$

Во внешнем поле $h \neq 0$ имеем:

$$\begin{aligned} \langle \sigma^{x,z} \rangle &= [h_{z,0} / 2(h_z^2 + h_0^2)^{1/2}] \text{th}[\omega_0(h) / 2T], \\ \omega_0^2(h) &= \omega_0^2 + (\mu_B g_{\text{орт}} h_z)^2, \quad g_{\text{орт}} \approx 6,63, \\ h_0 &= \omega_0 / \mu_B g_{\text{орт}} \approx 4,8 \text{ кЭ}. \end{aligned} \quad (4)$$

Как видно из (3), (4), при $T=0$ величина $H_{\text{ст}}$ растет с h_z от $H_{1x} + H_{2x} \approx 43$ кЭ при $h_z = 0$ до значений $\sim (H_{1x}^2 + H_z^2)^{1/2} = 184$ кЭ ($H_{\text{ст}}$ возрастает в два раза при $h_z = \sqrt{3} h_0 H_{1x} / H_z$). С ростом температуры $H_{\text{ст}}$ быстро падает (при $T \sim \omega_0(h)$) до H_{1x} , а затем медленно уменьшается, как намагниченность матрицы (так как $H_{1x} \sim s$). Величина перепада составляет 4 кЭ при $h_z = 0$ и быстро возрастает с h_z . Температурная зависимость $H_{\text{ст}}$ при различных значениях h_z показана на рисунке.



Интенсивность линии ЯМР определяется, как известно, поглощением матрицы на частоте ω_n . Приведем выражение для квадрата коэффициента усиления при $h_z = 0$ в переменном поле $h \parallel e_x$

$$\eta_x^2 = 4 \sin^2 \frac{\alpha}{2} (u_{10} + v_{10})^4 \langle \sigma^z \rangle^2 \frac{\mu_B^2 g_{\perp}^2 H_z^2}{\omega_{10}^2}, \quad (5)$$

где α – угол между подрешетками матрицы, u_{1k}, v_{1k} – коэффициенты $u-v$ преобразования, а ω_{1k} – частота магнона нижней ветви, $g_{\perp} - g$ – фактор иона Co^{2+} в базисной плоскости. Используя значение $\omega_{10} = \mu_B \tilde{g} \sqrt{h_y h_D}$ (h_D – поле Дзялошинского), вы-

разим η_x^2 через измеряемые величины :

$$\eta_x^2 = \frac{\langle \sigma^z \rangle^2}{s^2} \left(\frac{\chi_{\perp}}{\chi_{\parallel}} \right)^2 \left(\frac{g_{\parallel}}{g} \right)^4 \left(\frac{H_z}{h_y} \right)^2, \quad (6)$$

где χ_{\perp} , χ_{\parallel} — восприимчивости матрицы. Таким образом, коэффициент усиления при $T < \omega_0$ определяется в основном фактором H_z / h_y , намного превосходящим обычное феноменологическое значение $\omega_n / 2 \mu_I h_y = H_{ст} / h_y$. С ростом T коэффициент η_x падает, достигая асимптотически феноменологического значения $\sim H_{1x} / h_y$. Кроме того, η_x падает с ростом h_z , что определяется фактором $\langle \sigma^z \rangle \langle H_{ст}^x \rangle / H_{ст}$.

В заключение отметим, что полученные результаты допускают простую экспериментальную проверку.

Литература

1. Боровик-Романов А.С., Мещеряков В.Ф. Письма в ЖЭТФ, 1968, 8, 425.
2. Думеш Б.С., Егоров В.М., Мещеряков В.Ф. ЖЭТФ, 1971, 61, 320.
3. Иванов М.А., Локтев В.М., Погорелов Ю.Г. ФТТ, 1983 (в печати).
4. Абрагам А., Блинн Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. М.: Мир, 1972.
5. Ok H.N. Phys. Rev., 1969, 185, 472.
6. Prinz G.A., Forester D.W., Lewis J.L. Phys. Rev., 1973, B8, 2155.

Институт металлофизики
Академии наук Украинской ССР

Институт теоретической физики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
9 февраля 1983 г.