

О ФОРМЕ ЛИНИИ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ВБЛИЗИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПРИ УЧЕТЕ КВАДРАТИЧНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

© М.А. Попов

Красноярский государственный университет,
 660062 Красноярск, Россия
 (Поступило в Редакцию 9 августа 1995 г.)

Чувствительность частоты магнитного резонанса Ω к положению спина в твердом теле позволяет определить тип и параметры подвижности атомов и молекул в исследуемых образцах. Так, форма линии резонанса связана с корреляционной функцией $\langle \eta(t)\eta \rangle$ отклонений атомов от положения равновесия соотношением [1]

$$g(\omega) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left\{ i(\omega - \Omega_0)t - \Omega_1^2 \int_0^t d\tau (t - \tau) \langle \eta(\tau)\eta \rangle \right\}. \quad (1)$$

При получении (1) был сделан ряд допущений: а) для спиновой подсистемы использовалось высокотемпературное приближение; б) спин-спиновое взаимодействие вносит вклад только в эффективное поле на резонирующем спине; в) не учтено воздействие спиновой подсистемы на решеточную подсистему — движение атомов рассматривается как независимый гауссовский случайный процесс (ГСП), угловые скобки обозначают усреднение по этому процессу; д) ГСП через спин-решеточное взаимодействие оказывает только линейное воздействие на резонансную частоту $\Omega(t) = \Omega_0 + \Omega_1 \eta(t)$.

За исключением узкой окрестности температуры перехода $|T - T_c|/T_c < 10^{-4} - 10^{-3}$ [2], поведение решеточной подсистемы успешно описывается в приближении самосогласованного поля, позволяющем рассматривать движение атомов как ГСП. Поэтому подход, развитый в [1], использовался и при исследовании влияния линейных флуктуаций на форму линии магнитного резонанса вблизи непрерывного структурного перехода в несоразмерную фазу [3,4].

Для описания экспериментально наблюдаемой резонансной линии допущение д часто непригодно [5]. Так, отсутствие линейного вклада η в Ω ($\Omega_1 = 0$) характерно для спинов, находящихся в частных позициях ячейки кристалла. Поэтому в настоящей работе рассматривается действие квадратичного вклада

$$\Omega(t) = \Omega_0 + \Omega_1 \eta(t) + \Omega_2 \eta(t)^2/2. \quad (2)$$

Как показано в [1], фурье-образ линии резонанса при допущениях а и б равен

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega g(\omega) \exp(-i\omega t) = \left\langle \exp \left\{ -i \int_0^t dt' \Omega(t') \right\} \right\rangle. \quad (3)$$

При расчете $G(t)$ допущение (с) позволяет использовать следующий подход. Представим (3) в виде

$$G(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\langle \left\{ -i \int_0^t dt' \Omega(t') \right\}^n \right\rangle. \quad (4)$$

Усреднение по ГСП позволяет представить среднее от произвольного произведения решеточных переменных в виде суммы произведений парных корреляционных функций, полученных всеми возможными спариваниями [6]. В графическом отображении результата усреднения для n -го слагаемого ряда (4) при (2) с $\Omega_0 = 0$ (несущественный сдвиг частоты) связанными диаграммами являются цепочки и петли

$$\left\langle \left\{ \int_0^t dt' \Omega(t') \right\}^n \right\rangle_{\text{con}} = (n! C_n (n-1)! O_n) / 2,$$

где

$$C_n = \Omega_1^2 \Omega_2^{n-2} \prod_{j=1}^n \left\{ \int_0^t dt_j \right\} \langle \eta_1 \eta_2 \rangle \langle \eta_2 \eta_3 \rangle \dots \langle \eta_{n-1} \eta_n \rangle$$

— цепочка n -го порядка,

$$O_n = \Omega_2^n \prod_{j=1}^n \left\{ \int_0^t dt_j \right\} \langle \eta_1 \eta_2 \rangle \langle \eta_2 \eta_3 \rangle \dots \langle \eta_n \eta_1 \rangle$$

— $\eta_j \equiv \eta(t_j)$. В результате (3), согласно теореме Майера [7], можно представить в виде

$$G(t) = \exp \left\{ F_c(t) + F_0(t) \right\},$$

где

$$F_c(t) = \sum_{n=2}^{\infty} (-i)^n C_n / 2, \quad F_0(t) = \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n O_n / 2n.$$

Общий подход к нахождению $F_c(t)$ и $F_0(t)$ при произвольной $\langle \eta(t) \eta \rangle$ развит в [8] и сводится к решению интегрального уравнения для вспомогательного ряда. Прямая оценка для больших времен дает

$$C_n \approx t \Omega_1^2 \Omega_2^{n-2} \langle \eta^2 \rangle_0^{n-1}, \quad O_n \approx t \Omega_2^n \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \langle \eta^2 \rangle_{\varepsilon}^n / 2\pi,$$

где $\langle \eta^2 \rangle_{\varepsilon} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \eta(t) \eta \rangle \cos(\varepsilon t)$. При оценке C_n учтено, что в спектре колебаний «мягкой» решеточной подсистемы в неупорядоченной и соразмерной упорядоченной фазах присутствует щель. В результате

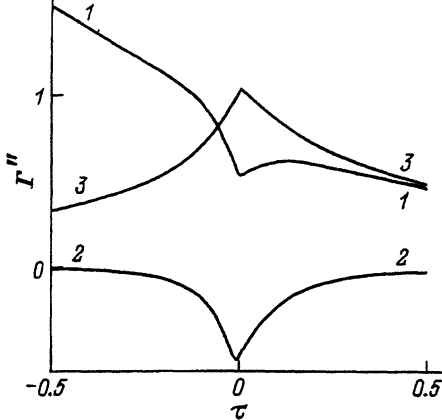


Рис. 1. Температурная зависимость частоты магнитного резонанса Γ'' вблизи непрерывного структурного фазового перехода в приближении самосогласованного поля при учете квадратичных флуктуаций.

1 — совместное действие цепочек и петель, 2 — действие цепочек, 3 — действие петлей.

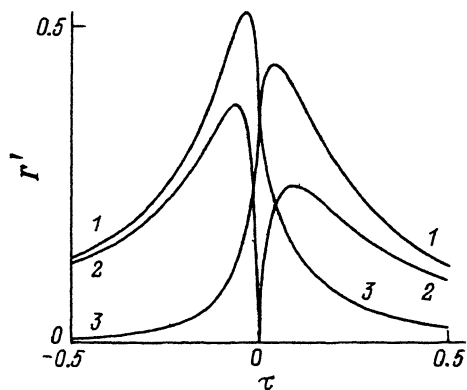


Рис. 2. Температурная зависимость ширины линии магнитного резонанса Γ' вблизи непрерывного структурного фазового перехода в приближении самосогласованного поля при учете квадратичных флуктуаций.

Обозначения те же, что на рис. 1.

центральную часть спектра магнитного резонанса можно аппроксимировать лоренцевской линией

$$g(\omega) \approx \Gamma' / \pi \left[(\Gamma'' - \omega)^2 + \Gamma'^2 \right],$$

где Γ' и Γ'' — соответственно действительная и мнимая части $\Gamma = \Gamma_c + \Gamma_0$,

$$\Gamma_c = \Omega_1^2 / 2 \left[\langle \eta^2 \rangle_0^{-1} + i\Omega_2 \right], \quad \Gamma_0 = \int_0^\infty d\varepsilon \ln \left[1 + i\Omega_2 \langle \eta^2 \rangle_\varepsilon \right] / 2\pi. \quad (5)$$

Из полученного следует, что вклад петель Γ_0 сдвигает (по знаку Ω_2) и уширяет резонансную линию. В то же время квадратичные флуктуации через вклад цепочек $\Gamma_c - \Gamma_1$ ($\Gamma_1 = \Omega_1^2 \langle \eta^2 \rangle_0 / 2$), смещая резонансную линию в противоположную сторону, уменьшают действие на Γ линейных флуктуаций, равное Γ_1 .

Согласно (5), квадратичный вклад решеточных флуктуаций в частоту магнитного резонанса делит окрестность фазового перехода на две части. Рост флуктуаций при приближении к T_c в дальней окрестности ($|\Omega_2 \langle \eta^2 \rangle_0| < 1$) приводит к росту как Γ_c , так и Γ_0 . В ближней же окрестности ($|\Omega_2 \langle \eta^2 \rangle_0| > 1$) цепочки кроме сдвига частоты приводят к спаду ширины резонансной линии, обусловленной линейными флуктуациями.

Этот эффект был смоделирован в приближении самосогласованного поля, для чего корреляционная функция фурье-компонент решеточных

флуктуаций была взята в типичной для приближения самосогласованного поля форме

$$\langle |\eta(\mathbf{k})|^2 \rangle_\varepsilon = 2\gamma T_c / \left[(\alpha + 3\beta \langle \eta \rangle^2 + \delta k^2 - m\varepsilon^2)^2 + \gamma^2 \varepsilon^2 \right],$$

где $\alpha = \alpha_0 \tau$, $\tau = T - T_c$. Учитывалось также, что ниже T_c коэффициенты в разложении $\Omega(\eta)$ по η становятся зависящими от температуры: $\Omega_n = \partial^n \Omega(\langle \eta \rangle) / \partial \langle \eta \rangle^n$. На рис. 1 и 2 представлены результаты моделирования при следующих значениях коэффициентов: $\Omega_0 = \langle \eta \rangle + \langle \eta \rangle^2 / 2$, $\Omega_1 = 1 + \langle \eta \rangle$, $\Omega_2 = 1$, $\langle \eta \rangle = \text{Re}\{(-\tau)^{1/2}\}$, $\gamma = 0.1$, $m = 0$, $T_c = \alpha_0 = \beta = \delta Q^2 = 1$, где Q — дебаевский волновой вектор.

Аномальное действие цепочек проявилось в ближней окрестности по обе стороны точки фазового перехода как на частоте, так и на ширине резонансной линии. При этом опережающий рост Ω_1 непосредственно ниже T_c по сравнению со спадом $\langle \eta^2 \rangle_0$ привел к тому, что обусловленный цепочками сдвиг резонансной частоты оказался максимальным несколько ниже T_c . Если в неупорядоченной фазе резонирующие спины находятся в плоскости симметрии, с нарушением которой связан структурный фазовый переход, то для наблюдения полученного эффекта желательно, чтобы угол между этой плоскостью и постоянным магнитным полем был достаточно мал.

Автор признателен В.Е.Зобову за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госкомвуза России (грант 94-31.3-14).

Список литературы

- [1] Anderson P.W. J. Phys. Soc. Jap. **9**, 3, 316 (1954).
- [2] Гинзбург В.Л. ФТТ **2**, 9, 2031 (1960).
- [3] Fajdiga A.M., Apih T., Dolinšek J., Blinc R., Levanyuk A.P., Minyukov S.A. Phys. Rev. Lett. **69**, 18, 2721 (1992).
- [4] Попов М.А., Александрова И.П., Примак С.В. Письма в ЖЭТФ **59**, 7, 464 (1994).
- [5] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М. (1975). 398 с.
- [6] Kubo R., Toda M., Hashitsume N. Statistical physics. Berlin-Heidelberg (1985). Т. 2. 279 р.
- [7] Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. М. (1965). 307 с.
- [8] Зобов В.Е., Попов М.А. ТМФ **102**, 2, 305 (1995).