

- [1] Александров К. С., Анистратов А. Т., Безноспков Б. В., Федосеева Н. В. Фазовые переходы в кристаллах галлоидных соединений АВХ₃. Новосибирск, 1981. 266 с.
 [2] Arakawa M., Ebisu H. // J. Phys. Soc. Jap. 1979. V. 46. N 5. P. 1571—1579.
 [3] Arakawa M., Ebisu H. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 51. N 1. P. 191—198.
 [4] Hidaka M., Hosogy S. // J. Physique. 1982. V. 43. N 8. P. 1227—1232.
 [5] Darlington C. N. W. // J. Phys. C. 1984. V. 17. N 16. P. 2859—2863.
 [6] Darlington C. N. W. // Phys. St. Sol. b. 1976. V. 76. N 1. P. 231—239.
 [7] Нпкифоров А. Е., Кроткий А. И., Попков С. В., Черницкий М. В. // Деп. в ВИНТИ 19.05.83, № 4962-83.
 [8] Нпкифоров А. Е., Кроткий А. И. // ФТТ. 1984. Т. 26. С. 2479—2481.
 [9] Леванюк А. П., Осипов В. В., Сигов А. С., Собынин А. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 1. С. 345—368.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило в Редакцию
30 марта 1988 г.
В окончательной редакции
29 августа 1988 г.

УДК 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ШИРИНА ЛИНИИ ДЭЯР, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ТВЕРДЫХ ПАРАМАГНЕТИКАХ

Г. Л. Бушвили, Н. П. Фокина

Несмотря на то что исследованию веществ методом двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) посвящено большое число работ [1-5], остается невыясненным вопрос о ширине ДЭЯР в случае, когда она обусловлена электронным диполь-дипольным (*dd*) взаимодействием. В [1] приведены выражения (4.18, 4.19, 4.38а) для вероятности W_n ядерного перехода с учетом усиления радиочастотного (РЧ) поля, обусловленного сверхтонким взаимодействием (СТВ), причем указывается, что W_n пропорциональна функции формы электронного спинового пакета. Однако такое утверждение с первого взгляда непонятно, так как в гамильтониане (4.18) остаются только ядерные спины, находящиеся под действием усиленного электронами РЧ поля. Данная работа посвящена выяснению этого вопроса.

Для упрощения задачи рассмотрим модельную систему — совокупность пар электрон + близкое (или собственное) ядро со спинами 1/2 в постоянном магнитном поле H_0 || z (z — главная ось парамагнитного центра (ПЦ)), связанных СТВ с константой $A_{||}$, значительно превышающей однородную ширину ЭПР и ядерную зеемановскую частоту. Пусть на эту систему действует линейно-поляризованное вдоль оси x РЧ поле с частотой Ω , близкой к частоте ЯМР, приблизительно равной $A_{||}/2$. Гамильтониан задачи имеет вид

$$\mathcal{H} = \omega_s S^z - \omega_I I^z + A_{||} \sum_i S_i^z I_i^z + \mathcal{H}'_d + \frac{A_{\perp}}{2} \sum_i (S_i^+ I_i^- + S_i^- I_i^+) + 2\gamma_e H_1 S^x \cos \Omega t - 2\gamma_I H_1 I^x \cos \Omega t, \quad (1)$$

где $\omega_s = \gamma_e H_0$, $\omega_I = \gamma_I H_0$, \mathcal{H}'_d — секулярная по отношению к первым трем членам (1) часть электронного *dd* взаимодействия, $2H_1$ — амплитуда РЧ поля. Преобразуя (1) к вращающейся с частотой ω_s системе координат и затем с учетом неравенства $\Omega \ll \omega_s$ проводя усреднение эффективного гамильтониана по формуле [6]

$$\bar{\mathcal{K}} = \mathcal{K}_0 + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{2\omega_k} [\mathcal{K}_k, \mathcal{K}_{-k}]$$

с точностью до $k=1$, получим

$$\bar{\mathcal{K}} = -\omega_I I^z + A_{\parallel} \sum_{\bar{i}} S_{\bar{i}}^z I_{\bar{i}}^z + \mathcal{K}'_d - \gamma_I H_1 \sum_{\bar{i}} \left(1 - \frac{A_{\perp} S_{\bar{i}}^z}{\omega_I}\right) (I_{\bar{i}}^+ + I_{\bar{i}}^-) \cos \Omega t. \quad (2)$$

Так как предполагалось, что A_{\parallel} гораздо больше электронной однородной ширины, то в (2) оператор $S_{\bar{i}}^z$ следует заменить его собственным значением M , после чего используем (2) для вычисления вероятности ядерного перехода

$$W_n = \frac{\pi (\gamma_I H_1)^2}{2} \left(1 - \frac{A_{\perp} M}{\omega_I}\right)^2 \{f_I(A_{\parallel} M + \Omega) + f_I(A_{\parallel} M - \Omega)\}, \quad (3)$$

$$f_I(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle I_{\bar{i}}^+(t) I_{\bar{i}}^- \rangle}{\langle I_{\bar{i}}^+ I_{\bar{i}}^- \rangle} \exp(i\omega t) dt,$$

$$I_{\bar{i}}^{\pm}(t) = \exp(i\mathcal{K}'_d t) I_{\bar{i}}^{\pm} \exp(-i\mathcal{K}'_d t).$$

Выражение (3) описывает известный факт [1] усиления вероятности ядерного перехода при $A_{\perp} \gg \omega_I$. Найдем ширину функции $f_I(\omega)$. Нам рассматривается случай, когда концентрация ПЦ достаточно высока, чтобы взаимодействие \mathcal{H}'_d обуславливало наименьший масштаб времени в системе. Тогда ширина $f_I(\omega)$, определяемая этим взаимодействием, гораздо больше ширины, обусловленной ядерным секулярным дипольным взаимодействием, а также гораздо больше ширины, определяемой медленными несекулярными процессами (спин-решеточной релаксацией, кросс-релаксацией). Если электронные уровни неоднородно уширены, явное выражение для \mathcal{H}'_d в случае $A_{\parallel} \gg \delta_{\text{сп}}$ (где $\delta_{\text{сп}}$ — ширина спин-пакета), аналогичное приведенному в [7], имеет вид

$$\mathcal{H}'_d = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{ijn'} \mathcal{A}_{ij} S_{in}^z S_{jn'}^z + \frac{1}{2} \sum_{ijn} B_{ij} (S_{in}^+ S_{jn}^- + S_{in}^- S_{jn}^+) (I_{\bar{i}}^z + I_{\bar{j}}^z) \right\}, \quad (4)$$

где i, j — номера узлов, занятых ПЦ; n, n' — номера пакетов,

$$B_{ij} = -\frac{\mathcal{A}_{ij}}{2} = -\frac{1}{2} \gamma_s^2 (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}) r_{ij}^z,$$

(4) отличается от выражения (1) в [7] учетом неоднородного уширения, а также тем, что множитель $(I_{\bar{i}}^z + I_{\bar{j}}^z)^2$ для облегчения вычислений заменен на $(I_{\bar{i}}^z + I_{\bar{j}}^z)$. Можно убедиться, что такая замена приводит лишь к численным множителям в выражениях для моментов функции $f_I(\omega)$, не меняющим их порядка. При вычислении моментов учтем, что электронная спин-система в лабораторной системе координат характеризуется двумя обратными температурами [7] β_s^m переходов с частотами $\omega_s^m = \omega_s + mA_{\parallel}$ ($m = \pm 1/2$), и при вычислении $\langle S_{in}^+ S_{in}^- \rangle = \sum_m (1/2 + 2mI_{\bar{i}}^z) \times \times S_{in}^+ S_{in}^- \rangle$ используем больцмановский фактор $\exp(-\sum_m \beta_s^m \omega_s^m) \text{Sp}^{-1} \{ \exp \times \times (-\sum_m \beta_s^m \omega_s^m) \}$. Если при наблюдении ДЭЯР полностью насыщается один из электронных переходов (допустим, ω_s^m), а второй остается при температуре решетки β_L^{-1} , то второй момент $f_I(\omega)$, вычисленный с помощью (4), равен

$$M_2^{\text{ДЭЯР}} = \frac{1 - P_L^2}{16} f \frac{\delta_{\text{сп}}}{\Delta^*} \sum_{\bar{i}}' B_{ij}^2, \quad (5)$$

где $p_L^2 = \text{th}^2(\omega_s^{-m} \beta_L/2)$; f — разбавление; Δ^* — ширина неоднородно-уширенной линии ЭПР; штрих у знака суммы означает суммирование по всем узлам, доступным для ПЦ. Для достаточно разбавленных парамагнетиков ($f \ll (\delta_{\text{сп}}/\Delta^*) \ll 1$) для $M_{\frac{1}{2}}^{\text{ДЭЯР}}$ имеем

$$M_{\frac{1}{2}}^{\text{ДЭЯР}} \sim (1 - p_L^2) f \frac{\delta_{\text{сп}}}{\Delta^*} \sum_i' B_{ij}^{\frac{1}{2}}.$$

Отношение $M_{\frac{1}{2}}/M_2^2$ оказывается гораздо больше единицы, что позволяет говорить о лоренцевой форме ДЭЯР перехода, обусловленной электронным dd взаимодействием, с шириной порядка

$$\delta_{\text{ДЭЯР}} \sim (1 - p_L^2) f \frac{\delta_{\text{сп}}}{\Delta^*} \left(\sum_i' B_{ij}^2 \right)^{1/2}. \quad (6)$$

Уширение электронными «флип-флопами» резонансной линии близких ядер физически объясняется тем, что они сокращают время жизни близких ядер на своих уровнях, общих с электронными. Множитель $\delta_{\text{сп}}/\Delta^*$ отражает тот факт, что в формировании ширины ДЭЯР участвуют только внутрипакетные «флип-флопы» электронных спинов. Для сравнения выражения (6) с шириной спин-пакета, т. е. шириной Фурье-образа корреляционной функции

$$\langle \langle S_{in}^+(t) S_{in}^-(t) \rangle + \langle S_{in}^- S_{in}^+(t) \rangle \rangle \langle \langle S_{in}^+ S_{in}^- \rangle + \langle S_{in}^- S_{in}^+ \rangle \rangle^{-1},$$

оценим второй и четвертый моменты этой функции. В тех же предположениях, что и раньше,

$$M_{\frac{1}{2}}^{\text{сп}} \sim (1 - p_L^2) f \sum_i' \mathcal{A}_{ij}^2, \quad M_{\frac{1}{2}}^{\text{п}} \sim f \sum_i' \mathcal{A}_{ij}^4, \quad (7)$$

(7) свидетельствует о лоренцевой форме спин-пакета с шириной

$$\delta_{\text{сп}} \sim (1 - p_L^2)^{1/2} f \left(\sum_i' \mathcal{A}_{ij}^2 \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Отношение

$$\frac{\delta_{\text{ДЭЯР}}}{\delta_{\text{сп}}} \sim \frac{\delta_{\text{сп}}}{\Delta^*} (1 - p_L^2)^{-1/2} \quad (9)$$

оказывается гораздо меньше единицы при достаточной степени неоднородности уширения и достаточно высоких температурах решетки.

Таким образом, если концентрация ПЦ, с одной стороны, достаточно высока, чтобы их dd взаимодействие играло решающую роль в формировании ширины ДЭЯР, а с другой стороны, достаточно мала, чтобы выполнялось условие $f \ll (\delta_{\text{сп}}/\Delta^*) \ll 1$, форма ДЭЯР, вопреки утверждению [1], не совпадает с формой спин-пакета, а уже последней в $\Delta^*/\delta_{\text{сп}}$ раз, т. е., как правило, на порядок. Проведем сравнение с результатами работы [8], где изучался ДЭЯР на донорах в кремнии. Ширина ДЭЯР на ядрах ^{31}P составляла около 10^4 Гц, а ширина спин-пакета считалась равной 10^6 Гц [1. с. 281]. Если оценить $\delta_{\text{сп}}/\Delta^* \sim 10^{-1}$ (см. фиг. 4.4 в [1]), то экспериментальный результат [8] согласуется с (9).¹

Л и т е р а т у р а

- [1] Абрагам А., Блيني Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. М., 1972. Т. 1. 651 с.
 [2] Baker J. M., Hurrell J. P. // Proc. Phys. Soc. 1963. V. 82. N 529. P. 742.

¹ Отметим также, что ширина радиочастотного дискретного насыщения (РЧДН) [9] (аналога ДЭЯР для близких ядер, находящихся в условиях дискретного насыщения) также гораздо меньше ширины спин-пакета. Для кристаллов типа флюорита с примесью ионов переходных элементов имеются следующие данные [9]: $\delta_{\text{РЧДН}} \sim 10^3 \div 10^4$ Гц, $\delta_{\text{сп}} \sim 10^5$ Гц, $\delta_{\text{сп}}/\Delta^* \sim 3 \cdot 10^{-2} \div 10^{-1}$.

- [3] Митрофанов Ю. Ф., Польский Ю. Е., Фалин М. Л. // ФТТ. 1969. Т. 11. № 12. С. 3555—3560.
 [4] Baker J. M., Davies E. R. // Proc. Roy. Soc. A. 1968. V. 398. N 1494. P. 403—431.
 [5] Liao N., Hartman J. // Phys. Rev. 1973. V. 813. P. 68—80.
 [6] Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., 1974. 503 с.
 [7] Buishvili L. L., Zviadadze M. D., Fokina N. P. // Physica. 1976. V. 84B. P. 200—206.
 [8] Feher G. // Phys. Rev. 1959. V. 114. P. 1219—1244.
 [9] Берулава Б. Г. // Автореф. докт. дис. Тбилиси, 1988.

Тбилисский государственный университет
Тбилиси

Поступило в Редакцию
9 июня 1988 г.
В окончательной редакции
29 августа 1988 г.

УДК 539.2 : 548.4 : 539.67 : 539.374

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ИССЛЕДОВАНИЕ ЧАСТОТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ АМПЛИТУДНО-ЗАВИСИМОГО ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ LiF и NaCl

С. Б. Кустов, С. Н. Голядин, А. В. Никифоров, Б. К. Кардашев

Вопрос о частотной зависимости амплитудно-зависимого внутреннего трения (АЗВТ) имеет принципиальное значение для выяснения физических механизмов этого явления [1-3]. Имеющиеся экспериментальные данные для монокристаллов меди [4, 5], свинца [6], цинка [7], магния [8] и поликристаллических стальных образцов [9, 10] противоречивы и не обнаруживают какой-либо общей закономерности.

Согласно точке зрения, что АЗВТ обусловлено статическим гистерезисом [2, 3, 5, 11-13], амплитудно-зависимые декремент колебаний и дефект модуля упругости не должны зависеть от частоты. Этот факт подтверждается рядом исследований АЗВТ резонансными методами [4-6]. Заметим, однако, что в этих экспериментах частоту колебаний обычно не удается изменить более чем в 2—3 раза.

С другой стороны, из представлений о термофлуктуационном преодолении дислокациями потенциальных барьеров [13-17] следует существование частотной зависимости амплитудно-зависимых внутреннего трения и дефекта модуля упругости с максимумом АЗВТ, положение которого зависит от температуры и амплитуды колебаний [15, 17]. Дефект модуля упругости должен монотонно расти с уменьшением частоты.

В данной работе приводятся результаты исследований амплитудно-зависимых обратимой неупругой деформации, дефекта модуля Юнга (ДМЮ) и декремента колебаний при циклическом знакопостоянном сжатии монокристаллов LiF и NaCl в диапазоне частот $5 \cdot 10^{-3}$ —2 Гц для различных амплитуд вынужденных колебаний.

Методика измерений основана на непосредственной регистрации гистерезисных петель нагрузка—деформация, возникающих при циклическом сжатии предварительно деформированных на 0.5 % образцов. Техника проведения экспериментов подробно рассмотрена в [18].

На рис. 1 показаны типичные частотные зависимости декремента δ и ДМЮ $\Delta E/E$ кристаллов LiF и NaCl при различных амплитудах колебательного напряжения σ_0 , максимальное значение которого не превышало обычно 70 % от напряжения течения образца. Видно, что во всех случаях ДМЮ (т. е. величина неупругой деформации) монотонно уменьшается с ростом частоты нагружения. Декремент колебаний может как увеличиваться с частотой (кристаллы LiF, большие амплитуды σ_0 ; кри-