

тае невелики, и их обнаружение требует проведения более точных и детальных измерений в указанной области температур.

Автор признателен С. П. Габуде за интерес к работе и обсуждение результатов.

#### Список литературы

- [1] Алиев В. А., Алджанов М. А., Алиев С. Н. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. № 9. С. 418—420.
- [2] Muller D., Eulenberger G., Hahn H. // Z. Anorg. Allg. Chem. 1973. V. 398. N 2. P. 207—220.
- [3] Van Vleck J. H. // Phys. Rev. 1948. V. 74. N 9. P. 1168—1183.
- [4] Панич А. М., Габуда С. П., Мамедов Н. Т., Алиев С. Н. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 12. С. 3694—3696.
- [5] Panich A. M., Gabuda S. P. // Abstr. IX AMPERE Summer School. Novosibirsk, 1987. P. 291.
- [6] Aldanov M. A., Mamedov K. K., Abdurragimov A. A. // Phys. St. Sol. (b). 1985. V. 131. N 1. P. K35—K37.

Институт неорганической химии  
СО АН СССР  
Новосибирск

Поступило в Редакцию  
11 января 1989 г.  
В окончательной редакции  
10 апреля 1989 г.

УДК 537.635

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 10, 1989

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКУЮ СИСТЕМУ ПРИ ОСЕВОМ СЖАТИИ ОБРАЗЦА

С. Н. Лукин

Теория взаимодействия ян-теллеровского комплекса с внешней деформацией, разработанная в [1] и примененная к тригональному кристаллу в [2], описывает изменение интенсивности компонент спектра ЭПР при осевом сжатии исследуемого образца по главной оси одного из трех геометрически неэквивалентных центров. Полученные на основании экспериментов деформационные коэффициенты  $V_{ES}$  при сопоставлении с теоретическими предсказаниями оказываются значительно меньшими по абсолютной величине. Так, для ян-теллеровской системы  $\text{Cu}^{2+} : \text{NaCl}$   $V_{ES} = -13\,000 \text{ см}^{-1}$  [3], а для ионов  $\text{Cu}^{2+}$  в лантан-магниево-нитрате  $V_{ES} = -3000 \text{ см}^{-1}$  [2]. В то же время теоретические оценки дают  $-20\,000$  [4] и  $-40\,000 \text{ см}^{-1}$  [5].

Аналитическое выражение для относительной интенсивности поглощения при ЭПР ян-теллеровского центра в одноосно сжатом образце по главной магнитной оси и  $\mathbf{H}_0 \parallel z$  имеет вид [2]

$$\frac{I_P(T)}{I_0} = \frac{3 \exp(-3\alpha P V_{ES}/2kT)}{2 + \exp(-3\alpha P V_{ES}/2kT)}, \quad (1)$$

где  $T$  — температура образца;  $\alpha$  — параметр, учитывающий упругие свойства кристалла.

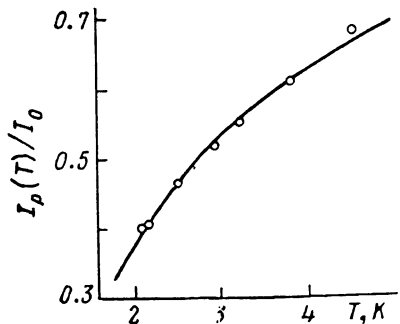
Наличие зависимости интенсивности поглощения при  $P \neq 0$  от температуры позволяет провести независимую проверку адекватности описания формулой (1) интенсивности спектра ЭПР.

Эксперимент проведен на изучавшейся ранее ян-теллеровской системе  $\text{Cu}^{2+} : \text{La}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24\text{H}_2\text{O}$  [2] с использованием радиоспектрометра ЭПР 4-мм диапазона. Осевое сжатие создавалось низкотемпературным прессом [6]. Температура образца изменялась медленной откачкой паров

из гелиевой ванны кристата радиоспектрометра. Измерение температуры проводилось полупроводниковым датчиком, размещенным в теле низкотемпературного пресса в непосредственной близости от образца.

При величине осевого сжатия  $50 \text{ кг/см}^2$  исследована температурная зависимость интенсивности компонент спектра ЭПР от центров с  $\text{H}_0 \parallel z$  в интервале температур  $4.5\text{--}2 \text{ К}$ . Изменение чувствительности радиоспектрометра корректировалось по калибровочному образцу. На рисунке приведены экспериментальные точки и рассчитанная по формуле (1) зависимость при  $P=50 \text{ кг/см}^2$  и  $V_{ES}=-3000 \text{ см}^{-1}$ .

Наблюдающееся хорошее согласие между экспериментом и расчетом свидетельствует о вполне корректном применении теории [1] к ян-теллеровским системам при осевом сжатии и надежном значении деформационного коэффициента  $V_{ES}=-3000 \text{ см}^{-1}$  для  $\text{Cu}^{2+} : \text{La}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24\text{H}_2\text{O}$ .



Температурная зависимость относительной интенсивности компонент спектра ЭПР ян-теллеровской системы  $\text{Cu}^{2+} : \text{La}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24\text{H}_2\text{O}$  при осевом сжатии образца.  $\text{H}_0 \parallel z$ ,  $\nu=74 \text{ ГГц}$ .

Полученное из эксперимента значение  $V_{ES}$  позволяет рассчитать для изучаемой ян-теллеровской системы главные ее характеристики на основании общепринятой теории [4]. Так, постоянная линейного вибронного взаимодействия равна

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{V_{ES}}{R} = -2.5 \cdot 10^{-5} \text{ эрг/см} \quad (2)$$

при расстоянии от иона  $\text{Cu}^{2+}$  до ближайшего лиганда — иона  $\text{O}^{2-}$  — в парамагнитном комплексе  $[\text{Cu} \cdot 6\text{H}_2\text{O}]^{2+}$   $R=2.066 \text{ \AA}$  [7]. Энергия Яна—Теллера

$$E_{JT} = V^2/2M\omega^2 = 1560 \text{ см}^{-1} \quad (3)$$

при массе лиганда  $M=16 \text{ у. е.} = 2.66 \cdot 10^{-23} \text{ г}$  и частоте гармонических колебаний E-типа для комплекса  $[\text{Mg} \cdot 6\text{H}_2\text{O}]^{2+}$   $\omega=205 \text{ см}^{-1} = 6.15 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ , определенной из экспериментов по рамановскому рассеянию света [8].

Полученное значение  $E_{JT}$  можно сравнить с крайними оценками, встречающимися в литературе:  $3000$  [9] и  $960 \text{ см}^{-1}$  [10].

В заключение следует отметить, что в настоящей работе при расчете величины энергии Яна—Теллера использовались только результаты экспериментов.

#### Список литературы

- [1] Ham F. S. // Phys. Rev. 1968. V. 166. N 2. P. 307—321.
- [2] Васюков В. Н., Лукин С. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 4. С. 1056—1061.
- [3] Borcherts R. H., Kazuzuki H., Abe H. // Phys. Rev. 1970. V. B2. N 1. P. 23—27.
- [4] Абрагам А., Блيني Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов: Пер. с англ. М., 1972. Т. II. 349 с.
- [5] Krupka D. C., Brren D. P., Williams F. I. B. // Phys. Rev. 1969. V. 179. N 2. P. 255—272.
- [6] Лукин С. Н., Цинцадзе Г. А. // ПТЭ. 1980. № 1. С. 166—167.
- [7] Zalkin A., Forrester J. D., Templeton D. H. // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. N 11. P. 2881—2891.
- [8] Lafont R. // Compt. rend. 1957. V. 244. P. 1481—1483.
- [9] Örik U., Pryce M. H. L. // Proc. Roy. Soc. A. 1957. V. 238. N 1221. P. 425—447.
- [10] Lee K. P., Walsh D. // Canad. J. Phys. 1971. V. 49. N 12. P. 1620—1629.