Влияние электрического поля на спектр ЯМР в центроантисимметричных антиферромагнетиках

© В.В. Лесковец, Е.А. Туров

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: leskovez@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 5 октября 1999 г.)

На основе симметрийного подхода исследуется влияние электрического поля **E** на спектр частот ЯМР антиферромагнетиков ромбоэдрической (Cr_2O_3) и тетрагональной (трирутилы Fe_2TeO_6 и др.) сингоний, обладающих линейным магнитоэлектрическим (МЭ) эффектом. Последний связан с наличием в их магнитной структуре центра антисимметрии $\bar{1}'$. Показано, что кроме тривиального влияния **E** на частоту ЯМР через суммарную намагниченность, обусловленную МЭ эффектом, существует также независимый механизм непосредственного влияния **E** на локальное поле на ядрах, которое, в частности, может приводить к дополнительному расщеплению частот ЯМР. Эффект рассмотрен в зависимости от обменной магнитной структуры и ориентационного состояния.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 99-02-16-268.

В кристаллах, кристаллическая симметрия (федоровская группа) которых включает центр симметрии $\bar{1}$, последний после антиферромагнитного (АФ) упорядочения может превратиться в центр антисимметрии (ЦАС) — элемент $\bar{1}' = \bar{1}\cdot 1'$ — ($1'$ — операция обращения времени) с точки зрения магнитной симметрии или нечетный элемент $\bar{1}(-)$ с точки зрения кристаллохимической симметрии. Нечетный элемент $g(-)$ связывает в решетке магнитные моменты, принадлежащие к магнитным подрешеткам с противоположными (а четный $g(+)$ — с одинаковыми) намагниченностями [1,2]. Такие ЦАС антиферромагнетики обладают так называемым магнитоэлектрическим (МЭ) эффектом — способностью электрически поляризоваться магнитным полем **H** (P_H-эффект) и намагничиваться электрическим полем (M_E-эффект)

$$\mathbf{P}_H = \hat{\alpha}\mathbf{H}, \quad \mathbf{M}_E = \hat{\alpha}^T\mathbf{E} \tag{1}$$

($\hat{\alpha}$ — тензор МЭ восприимчивости, T — операция транспонирования [3]). Вид тензора $\hat{\alpha}$ определяется из требования инвариантности (1) относительно точечной группы магнитной симметрии рассматриваемой магнитной структуры.

Вызывая в соответствии с (1) возникновение или изменение полной намагниченности **M**, поле **E** сказывается на локальных магнитных полях на ядрах, а следовательно, и на частотах ЯМР. Если бы этот, по сути тривиальный, канал влияния **E** на частоту ЯМР был единственным, то нашу работу фактически можно было бы считать законченной, поскольку, зная $\hat{\alpha}$, можно найти $\mathbf{M}_E$, а затем и рассчитать соответствующий вклад **E** в сверхтонкое поле на ядрах в каждой подрешетке для известной АФ структуры.

В действительности, однако, существует другой, независимый канал влияния **E** на локальные магнитные поля и, следовательно, на частоты ЯМР, определяемый непосредственно АФ вектором **L**, соответствующим рассматриваемой АФ структуре. С симметрийных позиций этот вклад **E** в локальное поле $\mathbf{H}^E_\nu$ на ядрах ν-й подрешетки определяется выражением

$$\mathbf{H}^E_\nu = \hat{\lambda}_\nu \mathbf{L}\mathbf{E}, \tag{2}$$

где вид матрицы $\hat{\lambda}_\nu = \lambda^\nu_{\alpha\beta\gamma}$ (α, β, γ принимают значения $x \equiv 1$, $y \equiv 2$, $z \equiv 3$)[1] находится из требований инвариантности (2) относительно группы локальной (островной) симметрии для атомов подрешетки ν, а связь между $\hat{\lambda}_\nu$, относящимся к разным подрешеткам, определяется элементами пространственной кристаллохимической симметрии, переводящими одну подрешетку в другую. Теоретическое рассмотрение этого канала влияния **E** на спектр частот ЯМР на примере ЦАС антиферромагнетиков двух типов — ромбоэдрических оксидов Cr_2O_3, тетрагональных трирутилов Fe_2TeO_6 и др. как раз и составляет основную цель настоящей статьи.

Имеются обстоятельства, которые несколько осложняют эту задачу. Речь идет о возможной (слабой) неколлинеарности четырехподрешеточных магнитных структур указанных антиферромагнетиков [4]. Но этот вопрос целесообразней затронуть в конце статьи при обсуждении результатов.

1. О магнитной структуре оксидов и трирутилов

Под магнитной структурой понимается совокупность обменной магнитной структуры (ОМС), определяемой направлениями магнитных моментов друг относительно

[1] Смысл такого двойного обозначения (буквенного и цифрового) состоит в следующем. Цифровые индексы применяются для констант матриц разложения, на которые преобразования симметрии при нахождении инвариантного вида этого разложения не действуют. Буквенные индексы (обычно у компонент векторов **L**, **E** и т. е.) относятся именно к тем переменным, по которым ведется разложение и которые преобразуются под действием указанных элементов симметрии.

друга вследствие обменного взаимодействия между ними, и ориентационного состояния (ОС), зависящего от направлений моментов относительно кристаллографических осей (магнитоизотропное релятивистское взаимодействие). Коллинеарная ОМС задается ее шифром [1,2], указывающим четности элементов — генераторов пространственной кристаллохимической группы кристалла. Поскольку химическая и магнитная ячейки для интересующих нас АФ совпадают, то трансляции на целые периоды можно считать тождественным элементом.

Для оксида хрома Cr_3O_3 кристаллохимическая симметрия определяется пространственной группой $R\bar{3}c(D^6_{3d})$, а магнитные ионы Cr^{3+} занимают четырехкратную позицию $4c$ с локальной симметрией $\{3\}$. В результате для кристаллов этого типа (к ним относится и гематит α-Fe_2O_3) оказываются возможными коллинеарные ОМС со следующими цифрами [2]:

$$(a)\ \bar{1}(+)3_z(+)2_x(-),\ \mathbf{L}_a = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_4,$$
$$(b)\ \bar{1}(-)3_z(+)2_x(+),\ \mathbf{L}_b = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4,$$
$$(c)\ \bar{1}(-)3_z(+)2_x(-),\ \mathbf{L}_c = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4,$$
$$(f)\ \bar{1}(+)3_z(+)2_x(+),\ \mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_4. \quad (3)$$

Справа приведены те линейные комбинации намагниченностей подрешеток $\mathbf{M}_\nu$ ($\nu = 1, 2, 3, 4$), которые представляют собой векторные параметры порядка соответствующих ОМС (базисные векторы). Для трех АФ структур (a, b, c) это будут векторы антиферромагнетизма $\mathbf{L}_a$, $\mathbf{L}_b$ или $\mathbf{L}_c$, а для четвертой, ферромагнитной (ФМ) структуры — вектор ферромагнетизма $\mathbf{M}$.

В зависимости от характера обменного взаимодействия каждая из этих ОМС может реализоваться сама по себе в чистом виде. Однако релятивистское взаимодействие может обусловливать слабую примесь к ней другой структуры. Например, к ЦС структуре (a), характерной для гематита (α-Fe_2O_3), примешивается структура (f), давая слабоферромагнитную структуру с $M \ll L_a$. К ЦАС структуре (c) с вектором $L_c \neq 0$ в принципе может примешиваться другая ЦАС структура (b) с $L_b \ll L_c$, приводя к слабонеколлинеарной магнитной структуре типа "крест" [5], в которой векторы $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ ($\mathbf{M}_3$ и $\mathbf{M}_4$) немного отходят от строгой параллельности друг другу, имеющей место в чистой структуре (c).

Сразу отметим, что для максимального упрощения задачи о влиянии поля $\mathbf{E}$ на спектр ЯМР будем пока пренебрегать последней указанной неколлинеарностью, тем более, что какие-либо экспериментальные данные о существовании таковой в рассматриваемых антиферромагнетиках не известны. Тем самым фактически полагается $\mathbf{L}_b = 0$, и мы имеем дело с двухподрешеточной моделью, в которой $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{M}_{\mathrm{I}}$ и $\mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_4 = \frac{1}{2}\mathbf{M}_{\mathrm{II}}$, так что $\mathbf{M} = \mathbf{M}_{\mathrm{I}} + \mathbf{M}_{\mathrm{II}}$ и $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_c = \mathbf{M}_{\mathrm{I}} - \mathbf{M}_{\mathrm{II}}$. В этом состоит первое наше приближение. О том, к чему приводит отказ от него, будет сказано в конце статьи.

Аналогичное рассмотрение можно провести для трирутилов с кристаллохимической симметрией $P4_2/mnm(D^{16}_{4h})$. Их магнитные ионы (Fe^{3+} или другие) занимают четырехкратную позицию $4e$ с локальной симметрией $\{mm\}$. Возможные для этих ионов ОМС описываются следующими шифрами и базисными векторами:

$$(a)\ \bar{1}(+)4_z(-)2_d(+),\ \mathbf{L}_a = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4,$$
$$(b)\ \bar{1}(-)4_z(+)2_d(-),\ \mathbf{L}_b = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4,$$
$$(c)\ \bar{1}(-)4_z(-)2_d(-),\ \mathbf{L}_a = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 - \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_4,$$
$$(f)\ \bar{1}(+)4_z(+)2_d(+),\ \mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_4. \quad (4)$$

Как и в предыдущем случае, для ЦС ОМС к $\mathbf{L}_a$ может примешиваться $\mathbf{M}$, давая слабоферромагнитную структуру, как это имеет место для NiF_2. А из двух ЦАС ОМС, (b) и (c), каждая может быть основной: или $\mathbf{L}_b$ с релятивистской примесью $L_c \ll L_b$, или $\mathbf{L}_c$ с примесью $L_b \ll L_c$. Структура (b) характерна для Fe_2TeO_6 и Cr_2TeO_6, а структура (c) реализуется в Cr_2WO_6 и V_2WO_6. Первое и последнее соединения имеют весьма высокие точки Нееля: соответственно $T_N = 210$ и 370 K. Указанной неколлинеарностью мы пока также пренебрегаем, ограничиваясь двухподрешеточной моделью: или с $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_b$ (при $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_3$, $\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_4$), или с $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_c$ (при $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_4$, $\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_3$).

Конечно, для рассмотрения нашей задачи кроме ОМС необходимо также знать ОС. Для его нахождения следует минимизировать полный термодинамический потенциал, состоящий из магнитной части (обмен, магнитная анизотропия, зеемановская энергия), а при наличии электрического поля $\mathbf{E}$ — еще и МЭ взаимодействия [6–8]

$$\Phi_{ME} = -\gamma_{\alpha\beta\gamma} L_\alpha P_\beta M_\gamma, \quad (5)$$

и энергии, связанной с поляризуемостью P в этом поле. (Напомним, что по дважды встречающимся "немым" индексам проводится суммирование). Для интересующих нас достаточно низких частот $P_\alpha = \varkappa_{\alpha\beta} E_\beta$, где $\varkappa_{\alpha\beta}$ — тензор электрической восприимчивости [7,8]. Вид коэффициентов матрицы $\gamma_{\alpha\beta\gamma}$ определяется из требований инвариантности (5) относительно элементов кристаллохимической симметрии, входящих в шифр соответствующей ОМС с учетом их четности. Мы не будем заниматься проблемой основного состояния, поскольку в дальнейшем предполагаем иметь дело с достаточно простыми ситуациями, где оно фактически известно, а некоторые простые соотношения, касающиеся главным образом полной намагниченности, включающей как магнитную, так и электрическую части,

$$M_\alpha = \chi_{\alpha\beta} H_\beta + \alpha_{\beta\alpha} E_\beta \equiv \mathbf{M}_H + \mathbf{M}_E, \quad (6)$$

будем приводить без вывода.

2. Локальные поля на ядрах и частоты ЯМР. Общий подход

Итак, локальное поле на ядре ν складывается из трех векторов, а именно сверхтонкого поля $\mathbf{H}^{hf}_\nu$, определяемого локальной намагниченностью на нем, — намагниченностью соответствующей подрешетки $\mathbf{M}_\nu$

$$H^{hf}_{\nu\alpha} = 4A^{\alpha\beta}_{\nu} M_{\nu\beta}, \tag{7}$$

внешнего поля $\mathbf{H}$ и введенного выше МЭ поля (2). Вид $A^{\alpha\beta}_\nu$ снова определяется из требований инвариантности (7) относительно указанных выше элементов локальной симметрии узла ν. Найдя таким образом поле $\mathbf{H}^{hf}_\nu$ для какого-либо одного конкретного номера ν, поле $\mathbf{H}^{hf}_{\nu'}$ на ядре любой другой подрешетки ν' можно определить из (7) с помощью операции симметрии, преобразующей узел ν в ν'. Так получаем сверхтонкое поле для всех четырех подрешеток оксида хрома или трирутилов.

Для дальнейшего целесообразно, как и в (2), перейти в (7) к вектору антиферромагнетизма $\mathbf{L}$ — основному базисному вектору, представляющему интересующую нас ОМС. Здесь и осуществляется переход к двухподрешеточной коллинеарной модели, о которой говорилось выше. Для структуры (c) оксида хрома в соответствии с (3) $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_c$ ($\mathbf{L}_a = \mathbf{L}_b = 0$), при этом $\mathbf{M}_{1,3} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} + \mathbf{L})$ и $\mathbf{M}_{2,4} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} - \mathbf{L})$. Для двух возможных ЦАС структур в трирутилах, (b) и (c), согласно (4), соответственно имеем: $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_b$ ($\mathbf{L}_a = \mathbf{L}_c = 0$), а $\mathbf{M}_{1,3} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} + \mathbf{L})$ и $\mathbf{M}_{2,4} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} - \mathbf{L})$, или $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_c$ ($\mathbf{L}_a = \mathbf{L}_b = 0$), так что $\mathbf{M}_{1,4} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} + \mathbf{L})$ и $\mathbf{M}_{2,3} = \frac{1}{4}(\mathbf{M} - \mathbf{L})$.

Имея в виду представить результаты влияния $\mathbf{E}$ на частоты ЯМР в наиболее простом виде, здесь мы сделаем второе существенное приближение — пренебрежем в (7) анизотропными элементами матрицы $A^{\alpha\beta}_\nu$, полагая

$$A^{\alpha\beta}_\nu = A\delta_{\alpha\beta}$$

($\delta_{\alpha\beta}$ — дельта-символ Кронекера). О роли недиагональных элементов снова будет идти речь при обсуждении результатов (вместе с ролью неколлинеарности магнитных структур в четырехподрешеточной модели).

Частота ЯМР для ядра подрешетки ν определяется модулем полного локального поля на нем [4]

$$\Omega_\nu \equiv \frac{\omega_\nu}{\gamma_n} = |\mathbf{H}^{hf}_\nu + \mathbf{H} + \mathbf{H}^E_\nu| \tag{8}$$

(γ_n — гиромагнитное отношение ядра). Не проделывая всю изложенную процедуру расчета Ω_ν в общем виде, приведем лишь окончательные результаты для некоторых интересующих нас простых частных случаев.

3. Легкоосное состояние для ОМС с четной главной осью симметрии: $\bar{1}(-)3_z(+)2_x(-)$ и $\bar{1}(-)4_z(+)2_d(-)$

Пусть при этом $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H} \parallel \mathbf{L} \parallel \mathbf{Z}$.

Результаты для обеих структур определяются одинаковыми выражениями

$$\Omega_1 = \Omega_3 = |A(L_z + M_z) + H_z + \lambda_{333} L_z E_z|,$$

$$\Omega_2 = \Omega_4 = |A(L_z - M_z) - H_z - \lambda_{333} L_z E_z|, \tag{9}$$

$$M_z = \chi_\parallel H_z + \alpha_{33} E_z (\alpha_{33} = \chi_\parallel \gamma_{333} \varkappa_{33} L_z), \tag{10}$$

где $\chi_\parallel$ и $\varkappa_{33}$ — магнитная и электрическая восприимчивости для полей вдоль $\mathbf{L} \parallel Z$. Здесь расщепление спектра ЯМР на две линии, обусловленное противоположными направлениями намагниченностей подрешеток (по и против поля $\mathbf{H}$), сохраняется и в поле $\mathbf{E} \neq 0$. Оба канала влияния $\mathbf{E}$ на спектр через M_E (M_E-канал) и через $\mathbf{H}^E_\nu$ (2) (LE-канал) лишь смещают эти линии аналогично полю $\mathbf{H}_z$. Различие действия этих двух каналов состоит, пожалуй, только в том, что по M_E-каналу сдвиг исчезает при температуре $T \to 0\,\mathrm{K}$ (вместе с продольной магнитной восприимчивостью $\chi_\parallel$), тогда как о LE-канале этого, вообще говоря, утверждать нельзя (независимый механизм).

Приведенные формулы (9) применимы для Cr_2O_3 и Fe_2TeO_6 в полях $H_z < H_{sf}$ — поля "спин-флопа".

4. Легкоосное состояние с $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H} \parallel \mathbf{L} \parallel \mathbf{Z}$ для ОМС $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$

Замена четной оси $4_z(+)$ на нечетную $4_z(-)$ приводит к существенному изменению влияния $\mathbf{E}$ на спектр, который в данном случае будет состоять из 4 линий

$$\Omega_{1,4} = |A(L_z + M_z) + H_z \pm \lambda_{333} L_z E_z|,$$

$$\Omega_{2,3} = |A(L_z - M_z) - H_z \mp \lambda_{333} L_z E_z|,$$

$$M_z = \chi_\parallel H_z \tag{11}$$

(здесь и далее первый индекс у Ω соответствует верхнему знаку в правой части, а второй индекс — нижнему знаку). При этом $M_E = 0$, так как $\alpha_{33} = 0$ для этой структуры, и следовательно, M_E-канала отсутствует и указанное дополнительное расщепление спектра обусловлено каналом LE.

К сожалению, известные нам трирутилы с нечетной осью $4_z(-)$ (Cr_2WO_6 и V_2WO_6) находятся в легкоплоскостном состоянии с $\mathbf{L} \perp 4 \parallel Z$. Поэтому далее рассматриваются антиферромагнетики именно в этом состоянии. Наиболее вероятные ("легчайшие") направления $\mathbf{L}$ в плоскости XY соответствуют осям [100] (или [010]), а также [110] (или [$\bar{1}$10]). О них и будет идти речь далее.

5. Легкоплоскостные трирутилы, $\mathbf{H} \parallel [100] \parallel X$, $\mathbf{L} \parallel [010] \parallel Y$, $\mathbf{E} \parallel Z$

Это ОС реализуется, если даже оно не является легчайшим, когда поле $\mathbf{H} \parallel X$ достаточно велико, чтобы преодолеть базисную анизотропию и установить $\mathbf{L} \perp \mathbf{H}$.

А. Структура $\bar{1}(-)4_z(+)2_d(-)$. В этом случае (и далее) удобно записывать выражения для квадратов частот ЯМР

$$\Omega^2_{1,2} = A^2 L_y(L_y + 2M_y) + 2AL^2_y \lambda_{113} E_z \pm 2L_y \lambda_{123} E_z H_x,$$

$$\Omega^2_{3,4} = A^2 L_y(L_y - 2M_y) - 2AL^2_y \lambda_{113} E_z \pm 2L_y \lambda_{123} E_z H_x, \tag{12}$$

$$M_y = \alpha_{32} E_z \quad (\alpha_{32} = \chi_\parallel \gamma_{223} \varkappa_{33} L_y). \tag{13}$$

Из (12) и (13) видно, что расщепление на четыре линии в этом случае целиком вызывается полем **E**. Однако в отсутствие LE-канала спектр содержал бы только две линии (за счет $M_y \equiv M_E$). Это расщепление исчезает (вместе с $\chi_{\|}$) при $T = 0\,\mathrm{K}$. Канал LE дополняет парное расщепление слагаемыми (член с λ_{113}), не исчезающими при $T \to 0\,\mathrm{K}$, и, кроме того, каждую из этих двух линий расщепляет еще на две (член с λ_{123}). При этом характерно, что последнее расщепление происходит при наличии как $E_z \neq 0$, так и $H_x \neq 0$, поскольку оно пропорционально произведению E_zH_x.

Б. Структура $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$. Здесь

$$\Omega_1^2 = \Omega_3^2 = AL_y^2(A + 2\lambda_{113}E_z) + 2L_y\lambda_{123}E_zH_x,$$

$$\Omega_2^2 = \Omega_4^2 = AL_y^2(A - 2\lambda_{113}E_z) + 2L_y\lambda_{123}E_zH_x. \quad (14)$$

Расщепление на две линии снова связано с LE-каналом (член с λ_{113}), а слагаемые с λ_{123} дают сдвиг линий в дублете, изменяющийся линейно с H_x. Канал M_E отсутствует (в рассматриваемом приближении).

6. Легкоплоскостные трирутилы, $\mathbf{H} \parallel [110] \parallel \mathbf{2}_d$, $\mathbf{L} \parallel [\bar{1}10]$, $\mathbf{E} \parallel Z$

Также приведем результаты для двух ОМС: $\bar{1}(-)4_z(+)2_d(-)$ и $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$.

А. Структура $\bar{1}(-)4_z(+)2_d(-)$.

$$\Omega_{1,3}^2 = A^2L_{y'}(L_{y'} + 2M_{y'}) + 2AL_{y'}^2(\lambda_{113} \mp \lambda_{123})E_z,$$

$$\Omega_{2,4}^2 = A^2L_{y'}(L_{y'} - 2M_{y'}) - 2AL_{y'}^2(\lambda_{113} \mp \lambda_{123})E_z. \quad (15)$$

Здесь направление $\mathbf{L} \parallel [\bar{1}10]$ принято за новую ось Y' системы координат $X'Y'Z$, получаемой из XYZ поворотом (по правилу правого винта) на 45° вокруг оси Z. При этом

$$M_{y'} = \alpha_{32'}E_z \ (\alpha_{32'} = \chi_{\|}\gamma_{2'32'}\varkappa_{33}L_{y'}), \quad (16)$$

т.е. имеет M_E-происхождение. Этот последний канал производит расщепление лишь на две линии. Дополнительное двукратное расщепление обусловлено каналом LE (слагаемые с λ_{123} в (15)). Понятно, что в индексах в (16) $2' \equiv y'$.

Б. Структура $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$.

$$\Omega_{1,4}^2 = AL_{y'}\left[(AL_{y'} - 2M_{y'}) + (-\lambda_{123} \pm \lambda_{113})L_{y'}E_z\right],$$

$$\Omega_{2,3}^2 = AL_{y'}\left[(AL_{y'} + 2M_{y'}) + 2(\lambda_{123} \pm \lambda_{113})L_{y'}E_z\right]. \quad (17)$$

В этом случае снова M_E-механизм приводит к расщеплению лишь на две линии (члены с $2M_{y'}$), и каждая из них расщепляется еще на две линии за счет LE-канала (в этот раз члены с λ_{123}).

По мнению авторов, главный и нетривиальный результат работы состоит в предсказании дополнительного канала (механизма) влияния поля **E** на спектр частот ЯМР не через МЭ восприимчивость (M_E-канал), а непосредственно через вектор антиферромагнетизма (LE-канал). Важно, что именно этот второй канал LE (слагаемые с $\lambda_{\alpha\beta\gamma}$) дает дополнительное расщепление спектра, причем различное для различных ОМС и ОС.

Здесь имеется определенная аналогия с ферромагнитным ($\propto M$) и антиферромагнитным (спонтанным, $\propto L$) вкладами в эффект Холла [9] и эффект Фарадея [10] в ЦС антиферромагнетиках. Там АФ вклад намного больше ФМ вклада. Можно надеяться, что и в данном случае для ЦАС антиферромагнетиков LE-канал по эффективности будет значительно превосходить M_E-канал. Это весьма существенно для эксперимента по влиянию поля **E** на спектр ЯМР, поскольку оценка сдвига частот, связанного с M_E-каналом, дает слишком малую величину. Эту оценку легко провести, если известна МЭ восприимчивость $\hat{\alpha}$. Находим $\mathbf{M}_E$, а затем, согласно приведенным выше формулам, и влияние **E** на частоты ЯМР по этому каналу. Оказывается, что такие оценки для сдвига дают в лучшем случае величины порядка ширины линии ЯМР. Что касается LE-канала, то его количественная эффективность может быть получена или непосредственно из эксперимента, или из расчетов на основе микротеории. (Авторы пытаются осуществить такие расчеты).

Притягательной стороной изложенных выше результатов в приложении к конкретным случаям является, во-первых, возможность уточнить или выбрать ОМС, применяя метод ЯМР с приложенным электрическим полем, в тех случаях, когда нейтронография (или другие методы) не дают однозначного ответа по этому поводу. Простейший реальный пример виден из сравнения формул (11) и (12), относящимся к одной и той же геометрии эксперимента ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{H} \parallel \mathbf{L} \parallel \mathbf{4} \parallel \mathbf{Z}$), но для ОМС, отличающихся только четностью оси симметрии 4_z. В первом случае имеются две линии ЯМР, во втором — четыре.

Другая возможность практического применения приведенных в работе формул состоит в решении вопроса о том, какое из ОС реализуется для легкоплоскостного (ЛП) антиферромагнетика (при $\mathbf{H} = 0$) с вектором **L**, параллельным ребру базисного квадрата ([100] или [010]) или его диагонали ([110] или $[1\bar{1}0]$). Например, для упомянутых выше ЛП трирутилов Cr_2WO_6 и V_2WO_6 нейтронный эксперимент пока не дал уверенного ответа на этот вопрос. Для поиска ответа с помощью ЯМР в присутствии поля $\mathbf{E} \parallel \mathbf{Z}$ необходимо, по-видимому, провести эксперимент в двух ситуациях: $\mathbf{H} \parallel [100]$ и $\mathbf{H} \parallel [110]$, соответствующих формулам (14) и (17), относящимся к ОМС $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$. Величина **H** должна быть достаточно большой, чтобы получить ОС с $\mathbf{L} \perp \mathbf{H}$ (независимо от того, какое из двух ОС является легчайшим). Затем для обеих ситуаций надо проверить, какие из формул (14) (две линии) или (17) (четыре линии) будут описывать эксперимент, если поле **H** уменьшать до значений, при которых можно ожидать, что вектор **L** уходит из исходного ОС, если оно не является легчайшим.

Здесь, однако, следует наконец обсудить отмеченные во введении осложняющие обстоятельства, связанные с возможной неколлинеарностью ОМС, а точнее — с наличием четырех подрешеток. Нетрудно показать, что в легкоосных состояниях с $\mathbf{L} \parallel 3$ или $\mathbf{L} \parallel 4$, для которых частоты ЯМР рассмотрены в разделах 4 и 5, неколлинеарность, а вместе с ней примесь к основному базисному вектору других векторов не возникает (подобно тому, как в α-Fe_2O_3 ниже точки Морина, где $\mathbf{L} \parallel 3 \parallel Z$, не появляется слабый ФМ). В результате для этого ОС спектр частот ЯМР в номинально четырехподрешеточных антиферромагнетиках будет попрежнему определяться соответствующими формулами (9) для ОМС $\underline{1}(-)3_z(+)2_x(-)$ и $\bar{1}(-)4_z(+)2_d(-)$ или формулами (11) для ОМС $\bar{1}(-)4_z(-)2_d(-)$.

Иначе обстоит дело в случае ЛП антиферромагнетиков. Для обсуждаемой выше магнитной структуры (для Cr_2WO_6 и V_2WO_6) к основному базисному вектору $\mathbf{L} \equiv \mathbf{L}_c \perp Z$ примешивается вектор $\mathbf{L}_b$ другой ЦАС ОМС, а именно такой, что

$$L_{bx} = cL_{cy},$$

$$L_{by} = cL_{cx}, \tag{18}$$

где c — константа. (Аналогично в α-Fe_2O_3 выше точки Морина и в NiF_2 возникает слабый ФМ в состоянии с $\mathbf{L} \perp Z$). Соотношения (18) означают, что релятивистски наведенный вектор $\mathbf{L}_b \perp \mathbf{L}_c$ (что и дает неколлинеарность), если $\mathbf{L}_c \parallel [100]$ (или $[010]$), и $\mathbf{L}_b \parallel \mathbf{L}_c$ для $\mathbf{L}_c \parallel [110]$ (или $[1\bar{1}0]$). И в том, и в другом случаях возникает анизотропный вклад в тензор сверхтонкого взаимодействия $A_\nu^{\alpha\beta}$ в (7). Это сказывается и на частотах: в формулах (14) добавляются соответственно слагаемые

$$-2cAL_yH_x \quad \text{и} \quad 2cAL_yH_x, \tag{19}$$

а в формулах (17) — слагаемые

$$-2cA^2L_{y'}^2 \quad \text{и} \quad 2cA^2L_{y'}^2. \tag{20}$$

В обоих случаях от указанной причины не возникает дополнительного расщепления, но члены, пропорциональные c, сказываются на величинах уже существующего расщепления. При этом в (14) сдвиги (19) исчезают при $H_x \to 0$, так что остается только расщепление, связанное с полем $\mathbf{E}$ (канал LE).

В случае формулы (17) дополнительные слагаемые (20) влияют только на двукратное расщепление (аналогично членам с $M_{y'}$), а появление четырех линий все равно остается обусловленным полем $\mathbf{E}$ по каналу LE (слагаемые с λ_{113}).

Таким образом, эффекты, связанные с учетом четырехподрешеточной структуры в рассматриваемых случаях не могут "замаскировать" предсказываемое в настоящей работе влияние поля $\mathbf{E}$ на спектр ЯМР. Тем не менее строгая теория должна, конечно, более детально исследовать роль анизотропии сверхтонкого тензора $A_\nu^{\alpha\beta}$, которая может возникать по ряду других причин. Такое исследование было проведено для ЦС антиферромагнетиков в [4, § 3.8] и в [11]. К тому же для ядер со спином $I > \frac{1}{2}$ (для Cr^{53} $I = \frac{3}{2}$) необходимо также учитывать квадрупольное расщепление спектра ЯМР. В настоящей работе, повторяем, использовалась самая упрощенная модель с тем, чтобы наиболее наглядно выявить принципиальную сторону задачи о влиянии $\mathbf{E}$ на этот спектр в ЦАС антиферромагнетиках.

Авторы признательны М.И. Куркину, В.В. Николаеву и А.С. Москвину за полезные замечания по работе.

Список литературы

[1] Е.А. Туров. УФН **164**, *3*, 325 (1994).
[2] Е.А. Туров. Кинетические, оптические и акустические свойства антиферромагнетиков. Изд-во УрО РАН, Свердловск (1990).
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. § 51. Наука, М. (1992).
[4] М.И. Куркин, Е.А. Туров. ЯМР в магнитоупорядоченных веществах и его применение. Наука, М. (1990).
[5] Е.А. Туров. Физические свойства магнитоупоряченных кристаллов. Изд-во АН СССР, М. (1963). Гл. 10.
[6] В.Г. Шавров. ЖЭТФ **48**, *5*, 1419 (1965).
[7] Е.А. Туров. ЖЭТФ **104**, *5*(*11*), 3886 (1993).
[8] Е.А. Туров, В.В. Меньшенин, В.В. Николаев. ЖЭТФ **104**, *6*(*12*), 4157 (1993).
[9] К.Б. Власов, Е.А.Розенберг, А.Г. Титова, Ю.М. Яковлев. ФТТ **22**, *6*, 1656 (1980).
[10] Б.Б. Кричевцов, К.М. Мукимов, Р.В. Писарев, М.М. Рувинштейн. Письма в ЖЭТФ **34**, *7*, 399 (1981).
[11] А.С. Москвин. ЖЭТФ **90**, *5*, 1734 (1986).