

## ЯМР И ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ОРТОФЕРРИТАХ

*А.К.Звездин*

Предлагается, основанный на теории симметрии, метод определения анизотропии сверхтонкого поля в магнитоупорядоченных кристаллах. Рассмотрена температурная зависимость частот ЯМР при переориентации спинов в ортоферритах. На основе магнитной фазовой диаграммы ортоферрита исследовано поведение частот ЯМР при ориентационных фазовых переходах.

Исследуем поведение частот ЯМР при ориентационных переходах. Для этого, определим связь сверхтонких полей, действующих на исследуемые ядра  $Fe^{57}$  с электронными намагниченностями. Удобно определить ее из теории симметрии.

1. Пусть  $M_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) – намагниченность  $i$  железной подрешетки, а  $h_i$  – сверхтонкое поле, действующее на ядра  $i$ -подрешетки. Известно, что следующие комбинации [1]

$$\begin{aligned} F &= M_1 + M_2 + M_3 + M_4, & A &= M_1 - M_2 - M_3 + M_4, \\ G &= M_1 - M_2 + M_3 - M_4, & C &= M_1 + M_2 - M_3 - M_4 \end{aligned} \quad (1)$$

преобразуются по одномерным неприводимым представлениям пространственной группы ортоферрита (таблица). Легко убедиться что также преобразуются следующие комбинации

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= \mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_3 + \mathbf{h}_4, & \mathbf{a} &= \mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3 + \mathbf{h}_4, \\ \mathbf{g} &= \mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_3 - \mathbf{h}_4, & \mathbf{c} &= \mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3 - \mathbf{h}_4. \end{aligned} \quad (2)$$

	$M_i$			$h_i$		
$\Gamma_1$	$F_x$	$G_z$	$C_y$	$f_x$	$g_z$	$c_y$
$\Gamma_2$	$F_y$	$A_z$	$C_x$	$f_y$	$a_z$	$c_x$
$\Gamma_3$	$F_z$	$G_x$	$A_y$	$f_z$	$g_x$	$a_y$
$\Gamma_4$	$G_y$	$A_x$	$C_z$	$g_y$	$a_x$	$c_z$

Наша задача – получить линейное соотношение между  $\mathbf{h}_i$  и  $\mathbf{M}_i$ . Очевидно, что линейные соотношения могут иметь место только между такими компонентами  $\mathbf{h}_i$  и  $\mathbf{M}_i$ , которые преобразуются по одному и тому же неприводимому представлению.

Перейдем к приближению двух подрешеток ( $\mathbf{A} = \mathbf{C} = 0$ ). Предположим также  $\mathbf{a} = \mathbf{c} = 0$ . Тогда согласно таблице, имеем:

$$\begin{aligned} f_x &= a_1 F_x + a_2 G_z, & g_z &= a_3 F_x + a_4 G_z, & f_y &= a_5 F_y, \\ f_z &= a_6 F_z + a_7 G_x, & g_x &= a_8 F_z + a_9 G_x, & g_y &= a_{10} G_y. \end{aligned}$$

Или, переходя к полям  $\mathbf{h}_{1,2} = \mathbf{f} \pm \mathbf{g}$ , получим:

$$\mathbf{h}_{1,2} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \pm a_8 \\ 0 & a_5 & 0 \\ \pm a_3 & 0 & a_6 \end{pmatrix} \mathbf{F} + \begin{pmatrix} \pm a_9 & 0 & a_2 \\ 0 & \pm a_{10} & 0 \\ a_7 & 0 & \pm a_4 \end{pmatrix} \mathbf{G}, \quad (3)$$

где знаки  $\pm$  и индексы 1, 2 относятся к двум неэквивалентным позициям ионов железа в кристалле.

2. Рассмотрим поведение частот ЯМР при переориентации спинов, происходящей в плоскости  $ac$  кристалла. Обозначим  $F_x = F \sin \theta$ ,  $F_z = F \cos \theta$ ,  $G_x = G \cos \theta$ ,  $G_z = G \sin \theta$ , тогда

$$(h_{1,2})_x = b_1 \sin \theta \pm b_2 \cos \theta, \quad (h_{1,2})_y = 0, \quad (h_{1,2})_z = \pm b_3 \sin \theta + b_4 \cos \theta. \quad (4)$$

Сверхтонкие параметры  $b_1, b_2, b_3, b_4$  зависят от  $F$  и  $G$ ; при не очень сильных магнитных полях ( $H \ll d$ ,  $d$  – поле Дзялошинского) их можно считать константами.

Ядро  $\text{Fe}^{57}$  имеет спин  $I = 1/2$ ; частоты ЯМР его  $\omega_{1,2} = \gamma_n |\mathbf{h}_{1,2}|$ . Используя (4), получим

$$\omega_{1,2} = \gamma_n [b_1^2 + b_3^2 + (b_2^2 + b_4^2 - b_1^2 - b_3^2) \cos^2 \theta \pm (b_1 b_2 + b_3 b_4) \sin 2\theta]^{1/2} \quad (5)$$

Подставляя в (5) известный вид  $\theta(T)$  [2], получим:

$$\omega_{1,2} = \begin{cases} \omega_1 \equiv \gamma_n (b_2^2 + b_4^2)^{1/2}, & T > T_1 \\ \left[ \omega_2^2 + (\omega_1^2 - \omega_2^2) \frac{T - T_2}{T_1 - T_2} \pm 2\gamma_n^2 (b_1 b_2 + b_3 b_4) \frac{(T_1 - T)^{1/2} (T - T_2)^{1/2}}{T_1 - T_2} \right]^{1/2}, & T_2 < T < T_1 \\ \omega_2 \equiv \gamma_n (b_1^2 + b_3^2)^{1/2}, & T < T_2 \end{cases} \quad (6)$$

где  $T_2, T_1$  — температуры начала и конца переориентации. Эта формула согласуется с экспериментальными результатами работы [3]

3 Исследуем влияние магнитного поля  $H$  на частоты ЯМР при температурах близких к температуре переориентации (в плоскости  $ac$ ).

Пусть  $H \parallel C$ , тогда частоты ЯМР имеют следующий вид:

$$\omega_{1,2} = \gamma_n |h_{1,2} + H| = [(\omega_{1,2}^0)^2 + (\gamma_n H)^2 + 2\gamma_n^2 H^2 (\pm b_3 \sin \theta + b_4 \cos \theta)]^{1/2}, \quad (7)$$

где  $\omega_{1,2}^0$  — определяется формулой (5).

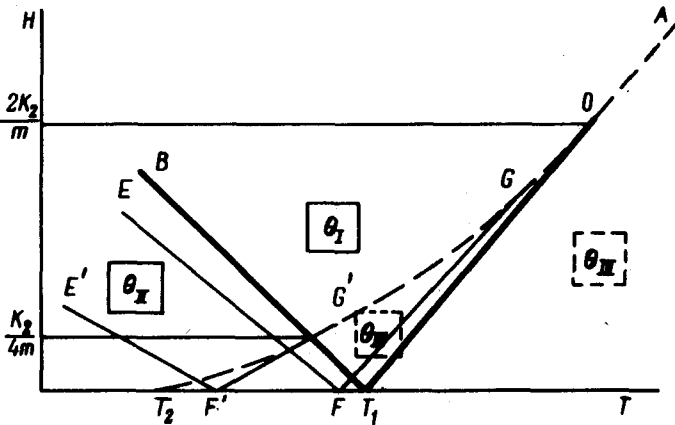


Рис. 1. Магнитная фазовая диаграмма редкоземельного ортоферрита вблизи температуры переориентации ( $H \parallel C$ )

Для того, чтобы проанализировать поведение частот ЯМР воспользуемся фазовой диаграммой ортоферрита вблизи области переориентации [4]. В простейшем случае она может быть получена из минимизации свободной энергии

$$F(\theta) = \frac{K_1(T)}{2} \sin^2 \theta + \frac{K_2}{4} \sin^4 \theta - mH \cos \theta, \quad K_1(T) = K \frac{T - T_1}{T_1},$$

$$K > 0, \quad K_2 > 0.$$

Результаты минимизации (см. рис. 1).

1. Фазы  $\theta_1$ . Линия потери устойчивости ее  $T, B$  определяется уравнением  $K_1(T) + mH = 0$ .

2. Угловая фаза  $\theta_{II}$ . Угол  $\theta$  определяется соотношением

$$\cos \theta = \begin{cases} 2r \operatorname{sh} \frac{1}{3} \operatorname{arc} \operatorname{sh} q/r^3, & T < T_2 \\ 2r \operatorname{ch} \frac{1}{3} \operatorname{arc} \operatorname{ch} q/r^3, & T_2 < T < T_1, \quad r^3 < |q|, \\ 2r \cos \left( \frac{\pi}{3} - \frac{1}{3} \operatorname{arc} \cos q/r^3 \right), & T_2 < T < T_1, \quad r^3 > |q| \end{cases} \quad (8)$$

где  $r = (|K_1 + K_2| / 3K_2)^{1/2}$ ,  $q = -\frac{mH}{2K_2}$ .

На линии  $T_1B$  угловая фаза непрерывно переходит в фазу  $\theta_I = 0$ .

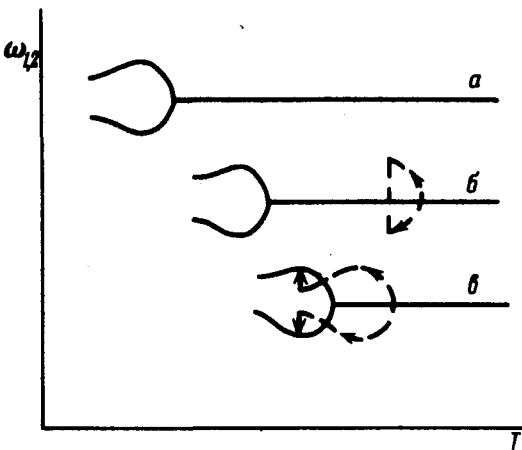


Рис. 2. Схематическое изображение возможных температурных зависимостей частот ЯМР при переориентации спинов. Расщепления частот, изображенные пунктирными кривыми, могут появиться только при охлаждении (при  $H \parallel c$ )  
 а. —  $H > 2K_2/m$ , б. —  $K_2/4m < H < 2K_2/m$ , в. —  $H < 2K_2/m$

3. Метастабильная фаза  $\theta_{III} = \pi$  — устойчива в области, ограниченной линией  $TT_1A$ ; уравнение линии  $T_1A$  есть  $K_1(T) = mH$ .

4. Метастабильная угловая фаза  $\theta_{IV}$ . Уравнение для  $\theta$

$$\cos \theta = -2r \cos \left( \frac{1}{3} \operatorname{arc} \cos q/r^3 \right). \quad (9)$$

На линии  $T_1O$  фаза  $\theta_{III}$  непрерывно переходит также в метастабильную фазу  $\theta_{IV}$ . Такой переход может реализоваться, ибо на линии  $T_1O$  метастабильная фаза  $\theta_{III}$  отделена от стабильной  $\theta_I$  энергетическим барьером. Линия  $T_2O$  — линия потери устойчивости (спинодаль) фазы  $\theta_{IV}$ . Она является огибающей семейства кривых равных углов,

ее уравнение есть

$$\left(\frac{K_1 + K_2}{3K_2}\right)^3 + \left(\frac{mH}{2K_2}\right)^2 = 0 \quad (10)$$

Величина скачка угла  $\theta$  на линии  $T_2O$  определяется формулой (9) при подстановке в нее (10). Точка  $O$  (аналог трехкритической точки) имеет следующие координаты ( $T_0 = T_1 [1 + (3K_2/K)]$ ,  $H_0 = 2K_2/m$ ).

Рассмотрим возможные переходы, происходящие в заданном магнитном поле при изменении температуры.

I. Стабильная фаза  $\theta_I$  при охлаждении всегда переходит в стабильную фазу  $\theta_{II}$  на линии  $BT_1$ . Этот переход обратим.

II. Переход из метастабильной фазы  $\theta_{III}$  в зависимости от величины магнитного поля может происходить различным образом: а)  $H > 2K_2/m$ . При охлаждении фаза  $\theta_{III}$  на линии  $OA$  скачком переходит в  $\theta_I$ ; и далее как в п. I. б)  $K_2/4m < H < 2K_2/m$ . При охлаждении  $\theta_{III} \rightarrow \theta_{IV}$  (непрерывно на линии  $OT_1$ ),  $\theta_{IV} \rightarrow \theta_I$  (скачком на  $T_2O$ ) и далее как в п. I. в)  $H < K_2/4m$ . При охлаждении  $\theta_{III} \rightarrow \theta_{IV}$  (непрерывно на  $OT_1$ )  $\theta_{IV} \rightarrow \theta_{II}$  (скачком на  $T_2O$ ) и далее как в п. I.

Все вышесказанное относится к однородным системам. В реальных образцах метастабильные фазы могут существовать в виде доменов. В этом случае области существования этих фаз на рис. 1 есть области возможного существования таких доменов.

Используя рассмотренную схему переходов, выражения для углов  $\theta(T)$  (8, 9) и формулу для  $\omega_{1,2}$  (7) можно построить температурные зависимости частот ЯМР. Схематически они изображены на рис. 2 при следующем соотношении между сверхтонкими параметрами  $b_2 \sim b_3 \sim \omega_1/\gamma$ ,  $b_1 \sim b_4 \sim 10^{-2} \omega_1/\gamma$ ,  $H_0 < b_1$ .

Для анализа поведения частот при  $H \parallel a$  нужно пользоваться соответствующей фазовой диаграммой [4].

Автор благодарен М.П.Петрову и Е.А.Турову за обсуждение работы.

Поступила в редакцию  
30 ноября 1973 г.

### Литература

- [1] Е.А.Туров. Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов, М., 1963 г.
- [2] К.П.Белов, А.М.Кадомова. УФН, 103, 557, 1971.
- [3] В.Д.Дорышев, Н.М.Ковтун, Е.Е.Соловьев, А.Я.Червоненкис, А.А.Шемяков. Письма в ЖЭТФ, 14, 501, 1971.
- [4] А.К.Звездин, В.М.Матвеев, А.И.Попов. Труды Междунар. конф. по магнетизму, М., 1973, в печати.