

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 537.622

© 1995

СПЕКТР ЯМР ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ ИОНОВ Cu^{2+}
В ФЕРРОШПИНЕЛЯХВ.Я.Митрофанов, В.П.Пащенко, В.К.Прокопенко,
А.Я.Филиман, А.А.ШемяковИнститут металлургии УрО РАН, Екатеринбург
(Поступило в Редакцию 16 мая 1994 г.)

1. В настоящей работе впервые проведено экспериментальное исследование спектрального распределения частот ЯМР примесных ян-теллеровских (ЯТ) ионов Cu^{2+} в никель-цинковых ($\text{Ni}_{0.35}\text{Zn}_{0.24}\text{Cu}_{0.12}\text{Fe}_{2.29}\text{O}_4$) и марганец-цинковых ($\text{Mn}_{0.6-x}\text{Zn}_{0.3}\text{Cu}_x\text{Fe}_{2.1}\text{O}_4$, $0 \leq x \leq 0.2$) ферритах.

Измерения спектров ЯМР проведены методом спинового эха при температуре $T = 1.8$ К. Использовались условия возбуждения сигналов ЯМР, характерные для ядер в доменных границах. Спектр ЯМР ионов Cu^{2+} , находящихся в октапозициях указанных соединений, занимает диапазон частот 75–190 МГц и представляет асимметричную линию с максимумом на частоте 160 МГц. Экспериментальный спектр в никель-цинковом феррите является суперпозицией спектров от изотопов ^{63}Cu и ^{65}Cu (рис. 1). Аналогичный спектр ЯМР от ионов меди наблюдается и в марганец-цинковом феррите.

Наблюдаемая форма спектра свидетельствует о значительной величине анизотропной составляющей локального поля на ядрах ионов меди. При этом распределение анизотропных сверхтонких полей определяется случайными кристаллическими полями на ЯТ ионах Cu^{2+} и изменениями намагниченности в доменных границах.

2. Интерпретация результатов основывается на анализе неоднородного уширения спектров ЯМР ионов Cu^{2+} с кубическим E -термом в основном состоянии [1]. Ограничимся для краткости рассмотрением спектров ЯМР лишь от ядер одного типа (^{63}Cu). Выражения для частот ЯМР указанных центров имеют вид

$$\omega_r = \{A_1^2 + A_2^2/2 + \rho(\mathbf{n})A_2(2A_1 \cos(\varphi - \gamma) + (A_2/2) \cos(2\varphi + \gamma))\}^{1/2} S,$$

$$\rho(\mathbf{n}) = [1 - 3(n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2)]^{1/2}, \quad \text{ctg } \varphi = \langle U_{E\vartheta} \rangle_T / \langle U_{E\varepsilon} \rangle_T, \quad (1)$$

где $S = 1/2$ — спин иона Cu^{2+} , A_1 и A_2 — параметры изотропного и анизотропного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) [2], n_i —

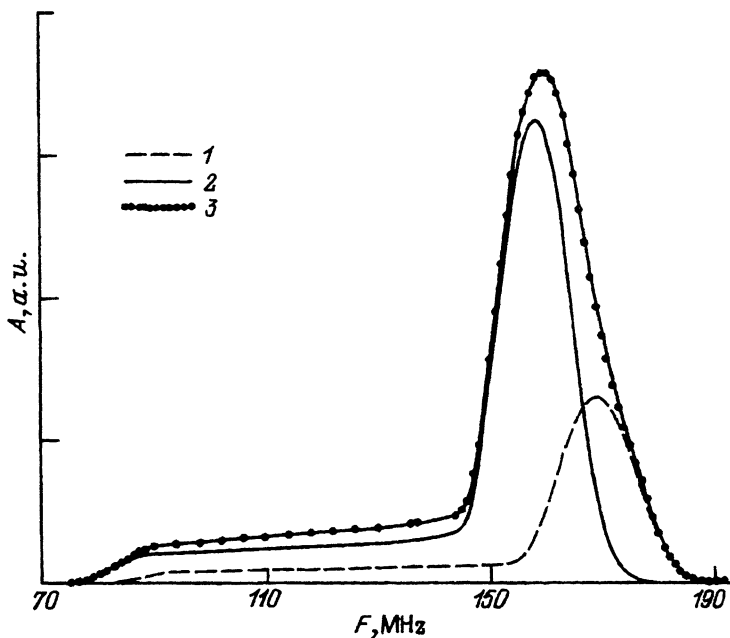


Рис. 1. Спектр ЯМР ионов $^{63,65}\text{Cu}$ в $\text{Ni}_{0.35}\text{Zn}_{0.09}\text{Cu}_{0.12}\text{Fe}_{2.29}\text{O}_4$.
 1 — ^{65}Cu , 2 — ^{63}Cu , 3 — эксперимент.

направляющие косинусы намагниченности, $U_{E\vartheta}$ и $U_{E\varepsilon}$ — орбитальные операторы, $\langle \dots \rangle_T$ означает квантово-статистическое усреднение, $\cos \gamma = (3n_z^2 - 1)/(2\rho(\mathbf{n}))$. Предполагалось также, что расщепление E -терма определяется случайными кристаллическими полями с дисперсией $\Gamma \gg T$.

Квадрупольное взаимодействие (КВ) приводит к дополнительному расщеплению частот переходов (1) между ядерными подуровнями M_I

$$\omega_r(M_I \rightarrow M_I \pm 1) = C(\pm 2M_I - 1) \cos(\varphi - \gamma_1),$$

$$\cos \gamma_1 = (3m_z^2 - 1)/(2\rho(\mathbf{m})), \quad (2)$$

где C — параметр КВ, m_i — направляющие косинусы оси квантования ядерного спина.

Рассмотрим предельные случаи динамического (а) и статического (б) эффектов ЯТ на ионе Cu^{2+} . Из выражения (1) видно, что максимальная ширина полосы поглощения имеет место при направлении спинов Cu^{2+} вдоль осей [001]-типа, когда $\omega_r^{[001]} = |A_1 + A_2 \cos \varphi|S$. При этом пики поглощения после конфигурационного усреднения по случайным полям соответствуют частотам [1]

$$\omega_{1,2} = |A_1 \pm A_2|S \quad (a); \quad \omega_1 = |A_1 + A_2|S, \quad \omega_2 = |A_1 - A_2/2|S \quad (b), \quad (3)$$

где параметр A_2 включает коэффициент вибронной редукции q в случае (а). Эти же частоты определяют верхнюю и нижнюю границы полосы поглощения, если параметры СТВ удовлетворяют условиям

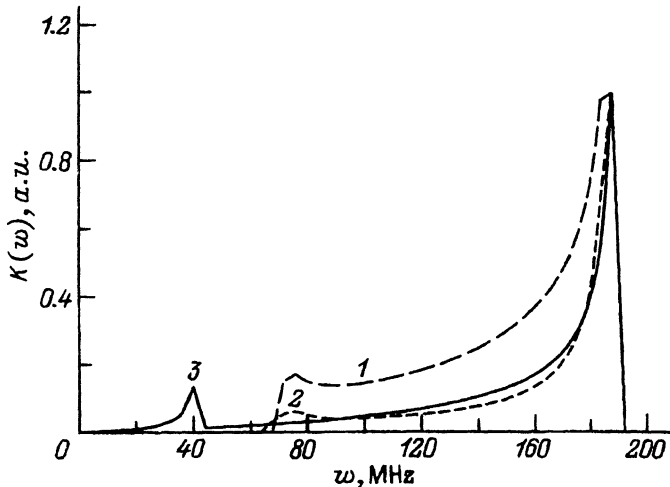


Рис. 2. Спектральные распределения ЯМР ионов Cu^{2+} .

1 — динамический эффект ЯТ ($A_1 = 260$, $A_2 = -120$ МГц, $C/A_2 = 0.01$), 2 — статический эффект ЯТ ($A_1 = 260$, $A_2 = -120$ МГц, $C/A_2 = 0.01$, $\Gamma/T = 5$), 3 — статический эффект ЯТ ($A_1 = -70$, $A_2 = -310$, $C = 0$ МГц, $\Gamma/T = 5$).

$|A_1| > |A_2|$ (а), $2A_1/A_2 > 1$ или $A_1/A_2 < -1$ (б). В противном случае полоса поглощения начинается с $\omega = 0$, а ее верхняя граница отвечает максимальной из частот $\omega_{1,2}$. Характерные расчетные зависимости коэффициента поглощения $K^{[001]}(\omega)$ представлены на рис. 2.

3. Остановимся на специфике спектра ЯМР ионов Cu^{2+} в доменных границах. Каждому направлению спина \mathbf{n} (1) соответствуют свои ширина полосы поглощения, угол α между направлениями электронного (\mathbf{n}) и ядерного (\mathbf{m}) спинов и величина коэффициента усиления $d(\mathbf{n}, \mathbf{m})$. Если поворот намагниченности происходит в плоскости, содержащей ось $[001]$, то предельная ширина интегральной полосы поглощения определяется частотами (3). Оценим параметры СТВ рассматриваемых систем по границам спектра, учитывая, однако, что нижняя граница спектра может сильно обрезаться из-за множителя ω^2 в коэффициенте поглощения. С учетом этого для параметров СТВ имеем $|A_1 + \xi A_2| = 380$ МГц, где $\xi = 1$ при $A_1/A_2 > 0$ и $\xi = -1$ (а), $-1/2$ (б) при $A_1/A_2 < 0$. Согласно [2], отношение A_1/A_2 равно

$$A_1/A_2 = (\kappa - y)/(6\xi - y(1 + 2.25\xi)),$$

$$\xi = 2/21, \quad y = -4\lambda/\Delta, \quad \kappa \cong 0.275,$$

где λ и Δ — параметры спин-орбитальной связи и кристаллического поля. Видно, что параметр изотропного СТВ $|A_1|$ превосходит $|A_2|$ лишь в области больших y ($y > 0.35$), когда A_1 и A_2 имеют разные знаки. При традиционно используемых значениях $y \cong 0.2$ [2] эти параметры отрицательны и $A_1/A_2 < 1$ ($A_1 = -19 \cdot 10^{-4}$, $A_1 + qA_2 = -63 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для $\text{MgO}:\text{Cu}^{2+}$). Оценка верхней границы спектра в этой области изменения параметров СТВ дает значение, близкое к наблюдаемому для статического предела эффекта ЯТ.

Положение максимума интегральной интенсивности $K(\omega)$ в случае 180° доменной стенки с легкой осью $[001]$ можно связать с частотами $\omega_T^{[111]} = S [A_1^2 + A_2^2/2]^{1/2}$ или $\omega_T^{[110]} = S [A_1^2 + 3A_2^2/4 + A_2A_1]^{1/2}$. Первая представлена в спектре при всех направлениях намагниченности в плоскости (110) . Второй может отвечать максимальный коэффициент усиления в доменной границе. Пик на экспериментальной кривой хорошо согласуется с величиной $\omega_T^{[110]}$ при следующих значениях констант СТВ: $A_1 = -(70 \mp 10)$, $A_2 = -(310 \pm 10)$ МГц, $y = 0.20 \pm 0.02$.

Таким образом, получена информация о константах СТВ иона Cu^{2+} в феррошпинелях и показана существенная роль анизотропных СТВ в формировании спектра ЯМР.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований.

Список литературы

- [1] Иванов М.А., Митрофанов В.Я., Фишман А.Я., Шемяков А.А. ФТТ **32**, 2, 433 (1990).
- [2] Ham F.S. Electron paramagnetic resonance. N.Y. (1972), P. 1.

УДК 539.4.01:539.211

© Физика твердого тела, том 37, № 4, 1995
Solid State Physics, vol. 37, N 4, 1995

ФРАКТАЛЬНАЯ ПОПРАВКА К ПРОЧНОСТИ И ВЯЗКОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ХРУПКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ С УЧЕТОМ АТОМНОЙ ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ РАЗРУШЕНИЯ

В.В.Покропичный, В.В.Скорозод

Институт проблем материаловедения им.И.Н.Францевича АН Украины,
Киев
(Поступило в Редакцию 26 мая 1994 г.)

Фрактальные свойства кристаллов являются в настоящее время предметом интенсивных исследований [1-3]. Мосолов [4], анализируя фрактальные свойства гриффитсовской трещины в теории упругости, получил асимптотическое выражение для коэффициента интенсивности напряжений K_{1c} и впервые связал его с фрактальной размерностью D . Однако явного выражения для прочности на разрыв σ и вязкости разрушения G_{1c} с учетом фрактальных свойств трещины получено не было и численных оценок не сделано. Восполним этот пробел.

Напомним, что в теории Гриффитса прочность на разрыв определяется из равенства приращения поверхностной $\Delta U_\gamma = 2\gamma\Delta l_g$ и упругой энергий $\Delta U_e = \pi\sigma_g^2 2l_g\Delta l_g/(4E)$ в условиях нормального раскрытия трещины [5]

$$\sigma_g = \sqrt{\frac{4\gamma E}{l_g}}, \quad (1)$$

где γ — поверхностная энергия, R — модуль Юнга, l_g — длина трещины Гриффитса.