Письма в ЖЭТФ, том 59, вып.7, стр.464 - 466 ©1994 г. 10 апреля

ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ФОРМУ СПЕКТРА ЯКР В НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЕ КРИСТАЛЛА Cs_2ZnI_4

М.А.Попов, И.П.Александрова, С.В.Примак**

Красноярский государственный университет
660062 Красноярск, Россия

**Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН*
660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 2 марта 1994 г.

Прямой процесс спин-решеточной релаксации, обусловленной локальными тепловыми флуктуациями амплитуды волны атомных смещений в несоразмерной фазе кристалла, может существенно влиять на форму линии резонансного спектра, ослабляя интенсивность концевых температурно-зависимых пиков частотного распределения и практически не влияя на температурно-независимые особенности этого распределения. По-видимому, это является причиной аномального поведения спектра ядерного квадрупольного резонанса ^{127}I в Cs_2ZnI_4 в некоторой области температур ниже перехода "нормальная" фаза – несоразмерная фаза.

При исследовании несоразмерной фазы в Cs_2ZnI_4 ($T_i = 118\,K$, $T_c = 108\,K$) методом ЯКР [1] обнаружено необычное температурное поведение спектра ^{127}I. Ниже T_i вместо расщепления линии "нормальной" фазы на два пика, ограничивающих непрерывное спектральное распределение резонансных частот ([2] и ссылки там), непосредственно ниже перехода наблюдается один асимметричный пик, вторая же концевая особенность постепенно появляется над уровнем шума с понижением температуры. Примерно в середине области существования узкой несоразмерной фазы спектр ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) принимает форму, типичную для модели статической плосковолновой модуляции [2]. В спектре одного из структурно неэквивалентных ядер йода ниже по температуре из уровня шума выше по частоте также постепенно появляется третья особенность частотного распределения.

Отклонение формы линии ЯМР от статической модели [2] непосредственно ниже T_i можно связать, как показано в [3], с тепловыми флуктуациями. Однако рассмотренный в [3] случай линейной связи резонансной частоты с параметром порядка не описывает особенности спектра ЯКР в Cs_2ZnI_4.

Воспользуемся представлением в адиабатическом приближении [4],

$$I(\omega) = (2\pi L)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{L} < \exp\{i[\omega t - \int_{0}^{t} \Omega(\eta(x,\tau))d\tau]\} > dx\,dt, \qquad (1)$$

где Ω – зависящая от локального параметра порядка η резонансная частота, угловые скобки означают усреднение по ансамблю, интегрирование по x проводится для усреднения спектра по рассматриваемой в настоящей работе одномерной модуляции.

Узость флуктуационной области структурных фазовых переходов ($|T - T_c|/T_c \ll 10^{-3} \div 10^{-4}$ [5]) позволяет воспользоваться теорией Ландау и функцию распределения флуктуаций параметра порядка считать гауссовой. Для дальнейших расчетов ограничимся: а) плосковолновой областью,

$$\eta(x,t) = \eta_1(x,t)\cos(qx) + \eta_2(x,t)\sin(qx) =$$

$$= [\eta_0 + \eta_1'(x,t)]\cos(qx) + \eta_2'(x,t)\sin(qx),$$

где $q = 2\pi/L$, $\eta_0 = <\eta_1(x,t)>$, фаза волны задана соотношением $<\eta_2(x,t)> = 0$, флуктуации $\eta_1'(x,t)$ и $\eta_2'(x,t)$ обусловлены тепловым возбуждением соответственно амплитудонных и фазонных мод; б) прямым процессом спин-решеточной релаксации, для чего в разложении $\Omega(\eta)$ по флуктуациям достаточно учесть

$$\Omega(\eta) \approx \Omega(\eta_0\cos(qx)) + \Omega'(\eta_0\cos(qx))[\eta_1'(x,t)\cos(qx) + \eta_2'(x,t)\sin(qx)],$$

где $\Omega'(\eta) = d\Omega(\eta)/d\eta$. Из-за малости частот ЯКР по сравнению с частотами кристаллических мод корреляционные функции вносящих основной вклад в (1) фурье-компонент рассматриваемых флуктуаций представимы в дебаевской форме:

$$< |\eta_1'(\mathbf{k},\omega)|^2 > = 2\gamma k_B T/[\gamma^2\omega^2 + (\alpha + \delta \mathbf{k}^2)^2],$$

$$< |\eta_2'(\mathbf{k},\omega)|^2 > = 2\gamma k_B T/[\gamma^2\omega^2 + \delta \mathbf{k}^4],$$

где $\alpha \sim |T - T_i|$. С учетом описанных допущений выражение (1) преобразуется в

$$I(\omega) \approx (2\pi L)^{-1} \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{0}^{L} \exp\{i[\omega - \Omega(\eta_0\cos(qx))]t - |\Omega_1(x)t| - |\Omega_2(x)t|^{3/2}\}dx\,dt, \qquad (2)$$

где

$$\Omega_1(x) = \gamma k_B T r_c \Omega'(\eta_0\cos(qx))^2\cos(qx)^2/4\pi\delta^2, \qquad r_c = (\delta/\alpha)^{1/2},$$

$$\Omega_2(x) = \gamma^{1/3}[k_B T\Omega'(\eta_0\cos(qx))^2\sin(qx)^2/6]^{2/3}/\pi\delta.$$

Для дальнейших расчетов необходимо обратиться к численным методам, поэтому проанализируем полученное выражение. Если пренебречь спин-решеточной релаксацией через амплитудоны и фазоны, то $\Omega_1(x) \approx \Omega_2(x) \approx 0$, и (2) переходит в известное для статической модели соотношение $I(\omega) = L^{-1}\sum|\partial\Omega(\eta_0\cos(qx)/\partial x|^{-1}$, где суммирование проводится по всем решениям уравнения $\omega = \Omega(\eta_0\cos(qx))$. На континуальном распределении частот присутствуют пики, соответствующие экстремумам частотного распределения $\partial\Omega(\eta_0\cos(qx)/\partial x = \Omega'(\eta_0\cos(qx))(-q\sin(qx)) = 0$. Частоты пиков, отвечающих $\sin(qx) = 0$, изменяются с температурой согласно $\Omega(\pm\eta_0)$, а отвечающих $\Omega'(\eta_0\cos(qx)) = 0$ – не изменяются.

Релаксация через фазоны не оказывает практически действия на все перечисленные пики, поскольку на их частотах $\Omega_2(x) = 0$. Действие же релаксации через амплитудоны оказывается селективным: $\Omega_1(x) = 0$ для пиков с температурно-независимыми частотами, в то время как $\Omega_1(x) \neq 0$ для пиков с температурно-зависимыми частотами. В результате последние могут быть ослаблены или полностью подавлены. За счет уширения каждого отдельного спинового пакета в этой области спектра пик интенсивности может полностью исчезнуть в шумах. Возможно, по этой причине в [1] ниже T_i не наблюдалось обычного расщепления линии спектра ЯКР. Начальный рост второго и третьего пиков с шумового уровня и слабая температурная зависимость их частот могут быть связаны со спадом $\Omega_1(x)$ при приближении температурнозависимого пика к частоте соответствующего температурно-независимого пика.

Если при $T \geq T_i$ резонирующие атомы занимают общие положения в ячейке кристалла и в разложении $\Omega'(\eta_0)$ по η_0 доминирует $\Omega'(0)$, то с понижением температуры ниже T_i скорость релаксации $\Omega_1(x)$ спадает пропорционально r_c и пики с температурно-зависимыми частотами могут восстанавливаться при удалении от окрестности перехода. В случае частного положения $\Omega'(\eta_0)$ растет с понижением температуры не медленнее, чем $\eta_0 \sim r_c^{-1}$, что приводит к росту $\Omega_1(x)$ и большему эффекту ослабления этих пиков. Их восстановление наступает только в области насыщения η_0.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 93-02-2425).

---

1. И.П.Александрова, С.В.Примак, Е.В.Шеметов, А.И.Круглик, ФТТ **33**, 1344 (1990).
2. I.P.Aleksandrova, In: Incommensurate phases in dielectrics, v.1, ed. by R.Blinc and A.P.Levanyuk, Amsterdam (North Holland): Elsevier Science Publishers B.V. (1986), p. 277.
3. A.M.Fajdiga, T.Apih, J.Dolinŝek et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 2721 (1992).
4. А.Абрагам, Ядерный магнетизм, М.: ИЛ (1963). (A.Abragam, The principles of nuclear magnetism, Oxford: Clarendon Press (1961)).
5. В.Л.Гинзбург, ФТТ **2**, 2031 (1960).