АКУСТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том XIII 1967 Вып. 2

УДК 534—8+548

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ШИРИНЫ И СДВИГА ЛИНИИ АКУСТИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА

М. И. Пирожков, В. М. Чернов

Методом моментов исследована температурная зависимость сдвига и ширины линии акустического резонанса для систем со спинами $S = 1$ и $S = {}^3/_2$ в случае диполь-дипольных и квадруполь-квадрупольных взаимодействий.

Исследования по акустическому резонансу дают богатую информацию о структуре кристалла и о внутренних взаимодействиях между частицами. Наиболее полные сведения о характере взаимодействия можно почерпнуть из анализа формы линии поглощения. Большинство экспериментальных данных до недавнего времени хорошо интерпретировалось представлением о диполь-дипольном характере взаимодействий между частицами. В ряде же случаев, особенно для веществ с высоким спином, взаимодействие частиц как диполей не могло с достаточной полнотой объяснить результаты эксперимента. Это, как известно, связано с тем, что при возрастании спина частиц в веществе начинают доминировать мультиполь-мультипольные взаимодействия (диполь-квадрупольные, квадруполь-квадрупольные, октуполь-октупольные и т. д.). Автором работы [1] исследовалось влияние квадруполь-квадрупольных взаимодействий на ширину линии магнитного и акустического резонанса. Исследование проводилось методом моментов, наиболее удобным для сравнения с экспериментом, без учета конечности температуры спин-системы. Знание же температурной зависимости, несомненно, даст добавочную информацию о спин-системе.

В свете сказанного, представляет интерес рассмотреть влияние мультиполь-мультипольных взаимодействий на сдвиг и ширину линии с учетом температурных эффектов. Для поставленной задачи необходимо вычислить первый и второй моменты резонансной кривой.

Пусть имеется система N эквивалентных спинов с эквидистантными уровнями энергии, находящаяся в постоянном внешнем магнитном поле H. Моменты находим по формулам

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = \frac{1}{2} \frac{\langle [a_z, [\overline{H}, a]_-]_- \rangle_T}{\langle [a_+, a_-]_- \rangle_T}, \tag{1}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{\langle [a_-, \overline{H}]_-, [\overline{H}, a_+]_- \rangle_T}{\langle [a_+, a_-]_- \rangle_T}, \tag{2}$$

где $\overline{H}$ — диагональная часть гамильтониана, a — оператор, вызывающий резонансные переходы, $[,]_-$ — коммутатор, $\langle \quad \rangle_T$ — квантовомеханическое усреднение с матрицей плотности

$$\langle A \rangle_T = Sp\{qA\}, \qquad q = \exp(-xS_z)\{Sp\exp(-xS_z)\}^{-1}, \qquad x = g\beta H / kT.$$

Здесь g — g-фактор, β — магнетон Бора (ядерный или электронный), k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, S_z — z компонента спинового оператора. Для вычисления моментов использовались результаты работы [2]. Были рассмотрены диполь-дипольные и квадруполь-квадрупольные взаимодействия (этим типам взаимодействий соответствуют в работе [2] случаи: $L = 2$, $B = 2$, переходы $n = 1$, $n = 2$ и $B = 2$, переходы те же) для систем со спинами $S = 1$ и $S = {}^3/_2$. Получены следующие выражения моментов:

1. Система со спином $S = 1$.

а) диполь-дипольное взаимодействие

1) переход $n = 1$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{2(B^2 + 2\,\mathrm{sh}^2 x)}{\sqrt{6}\,A\,\mathrm{sh}\,x} \sum\nolimits_1^2, \tag{3}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{1}{A^2}\left[3A\,\mathrm{ch}\,x \sum\nolimits_{11}^2 + \frac{2}{3}(5B^2 + 4\,\mathrm{sh}^2 x) \sum\nolimits_{11}^3\right], \tag{4}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \langle \Delta\nu^2 \rangle - \langle \Delta\nu^1 \rangle^2 = \frac{1}{12A^2\,\mathrm{sh}^2 x}\Big[(33\,\mathrm{ch}\,3x - 28\,\mathrm{ch}\,2x +$$

$$+ 31\,\mathrm{ch}\,x - 36) \sum\nolimits_{11}^2 + 4(\mathrm{ch}\,3x - 6\,\mathrm{ch}\,2x - 15\,\mathrm{ch}\,x - 10) \sum\nolimits_{11}^3\Big]. \tag{5}$$

2) Переход $n = 2$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{8\,\mathrm{sh}\,x}{\sqrt{6}\,A} \sum\nolimits_1^2, \tag{6}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{2}{A^2}\left[3A\,\mathrm{ch}\,x \sum\nolimits_{11}^2 + \frac{16}{3}\,\mathrm{sh}^2 x \sum\nolimits_{11}^3\right], \tag{7}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{2(17 + 9\,\mathrm{ch}\,x + \mathrm{ch}\,2x)}{3A^2} \sum\nolimits_{11}^2; \tag{8}$$

б) квадруполь-квадрупольное взаимодействие

1) переход $n = 1$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{2(3B^2 + 2\,\mathrm{sh}^2 x)}{\sqrt{70}\,A\,\mathrm{sh}\,x} \sum\nolimits_2^2, \tag{9}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{1}{70A^2}\left[A(50\,\mathrm{ch}\,x + 13) \sum\nolimits_{22}^2 + 4(21B^2 + 4\,\mathrm{sh}^2 x) \sum\nolimits_{22}^3\right], \tag{10}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{1}{140A^2\,\mathrm{sh}^2 x}\Big[(158\,\mathrm{ch}\,3x - 271\,\mathrm{ch}\,2x + 418\,\mathrm{ch}\,x - 305) \sum\nolimits_{22}^2 +$$

$$+ 36(\mathrm{ch}\,3x - 6\,\mathrm{ch}\,2x + 15\,\mathrm{ch}\,x - 10) \sum\nolimits_{22}^3\Big], \tag{11}$$

2) переход $n = 2$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = \frac{2\,\mathrm{sh}\,x}{\sqrt{70}\,A} \sum\nolimits_2^2, \tag{12}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{1}{35A^2}\left[9A\,\mathrm{ch}\,x \sum\nolimits_{22}^2 + 2\,\mathrm{sh}^2 x \sum\nolimits_{22}^3\right], \tag{13}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{10 + 9\,\mathrm{ch}\,x + 8\,\mathrm{ch}\,2x}{35A^2} \sum\nolimits_{22}^2. \tag{14}$$

2. Система со спином $S = {}^3/_2$.

а) диполь-дипольное взаимодействие

1) переход $n = 1$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{2D_-E - 3C_-^2}{2\sqrt{6}C_+D_-} \sum_{1}^{2}, \tag{15}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{1}{48D_-C_+^2}\Big[C_+(81\,\mathrm{sh}\,3x - 56\,\mathrm{sh}\,2x + 49\,\mathrm{sh}\,x) \sum_{11}^{2} +$$

$$+ F(27\,\mathrm{ch}\,3x - 38\,\mathrm{ch}\,2x - 11\,\mathrm{ch}\,x + 22) \sum_{11}^{3}\Big], \tag{16}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{1}{48C_+^2D_-^2}\Big[(31\,\mathrm{ch}\,5x + 12\,\mathrm{ch}\,4x - 37\,\mathrm{ch}\,3x + 4\,\mathrm{ch}\,2x +$$

$$+ 70\,\mathrm{ch}\,x - 80) \sum_{11}^{2} + 3(\mathrm{ch}\,5x - \mathrm{ch}\,4x - 7\,\mathrm{ch}\,3x + 12\,\mathrm{ch}\,2x +$$

$$+ 6\,\mathrm{ch}\,x - 11) \sum_{11}^{3}\Big], \tag{17}$$

2) Переход $n = 2$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{2E}{\sqrt{6}\,C_+} \sum_{1}^{2}, \tag{18}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{1}{6C_+^2D_+}\Big[C_+(21\,\mathrm{sh}\,3x + 22\,\mathrm{sh}\,2x - 17\,\mathrm{sh}\,x) \sum_{11}^{2} +$$

$$+ 4D_+E^2 \sum_{11}^{3}\Big], \tag{19}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{1}{24C_+^2D_+^2}\Big[3\,\mathrm{ch}\,6x + 16\,\mathrm{ch}\,5x + 52\,\mathrm{ch}\,4x + 132\,\mathrm{ch}\,3x +$$

$$+ 125\,\mathrm{ch}\,2x - 148\,\mathrm{ch}\,x - 180\Big] \sum_{22}^{2}; \tag{20}$$

б) квадруполь-квадрупольное взаимодействие

1) переход $n = 1$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{6(3C_-^2 + 2D_-^2)}{\sqrt{70}\,C_+D_-} \sum_{2}^{2}, \tag{21}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = -\frac{9}{35C_+^2D_-}\Big[C_+(25\,\mathrm{sh}\,3x - 21\,\mathrm{sh}\,x) \sum_{22}^{2} + D_-(-25\,\mathrm{ch}\,3x +$$

$$+ 50\,\mathrm{ch}\,2x + 9\,\mathrm{ch}\,x - 34) \sum_{22}^{3}\Big], \tag{22}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{9}{70C_+^2D_-^2}\Big[(50\,\mathrm{ch}\,5x - 63\,\mathrm{ch}\,4x + 10\,\mathrm{ch}\,3x + 8\,\mathrm{ch}\,2x +$$

$$+ 68\,\mathrm{ch}\,x - 73) \sum_{22}^{2} + 18(\mathrm{ch}\,4x - 4\,\mathrm{ch}\,3x + 4\,\mathrm{ch}\,2x + 4\,\mathrm{ch}\,x - 5) \sum^{3}\Big]; \tag{23}$$

2) переход $n = 2$:

$$\langle \Delta\nu^1 \rangle = -\frac{3(6C_-^2 - D_+^2)}{\sqrt{70}\,C_+D_+} \sum_{2}^{2} \tag{24}$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle = \frac{9}{140 C_+^2 D_+}\Big[C_+(25\,\mathrm{sh}\,3x + 226\,\mathrm{sh}\,2x + 25\,\mathrm{sh}\,x)\sum\nolimits^2_{22} +$$

$$+ D_+(25\,\mathrm{ch}\,3x - 46\,\mathrm{ch}\,2x - 25\,\mathrm{ch}\,x + 46)\sum\nolimits^3_{22}\Big], \qquad (25)$$

$$\langle \Delta\nu^2 \rangle_c = \frac{9}{140 C_+^2 D_+^2}\Big[(104\,\mathrm{ch}\,5x + 89\,\mathrm{ch}\,4x - 36\,\mathrm{ch}\,3x + 196\,\mathrm{ch}\,2x -$$

$$- 68\,\mathrm{ch}\,x - 285)\sum\nolimits^2_{22} + 36(\mathrm{ch}\,5x - 2\,\mathrm{ch}\,4x - 3\,\mathrm{ch}\,3x + 8\,\mathrm{ch}\,2x +$$

$$+ 2\,\mathrm{ch}\,x - 6)\sum\nolimits^3_{22}\Big], \qquad (26)$$

где $A = 1 + 2\,\mathrm{ch}\,x$, $B = 1 - \mathrm{ch}\,x$, $C_\pm = \mathrm{ch}\frac{x}{2} \pm \mathrm{ch}\frac{3x}{2}$,

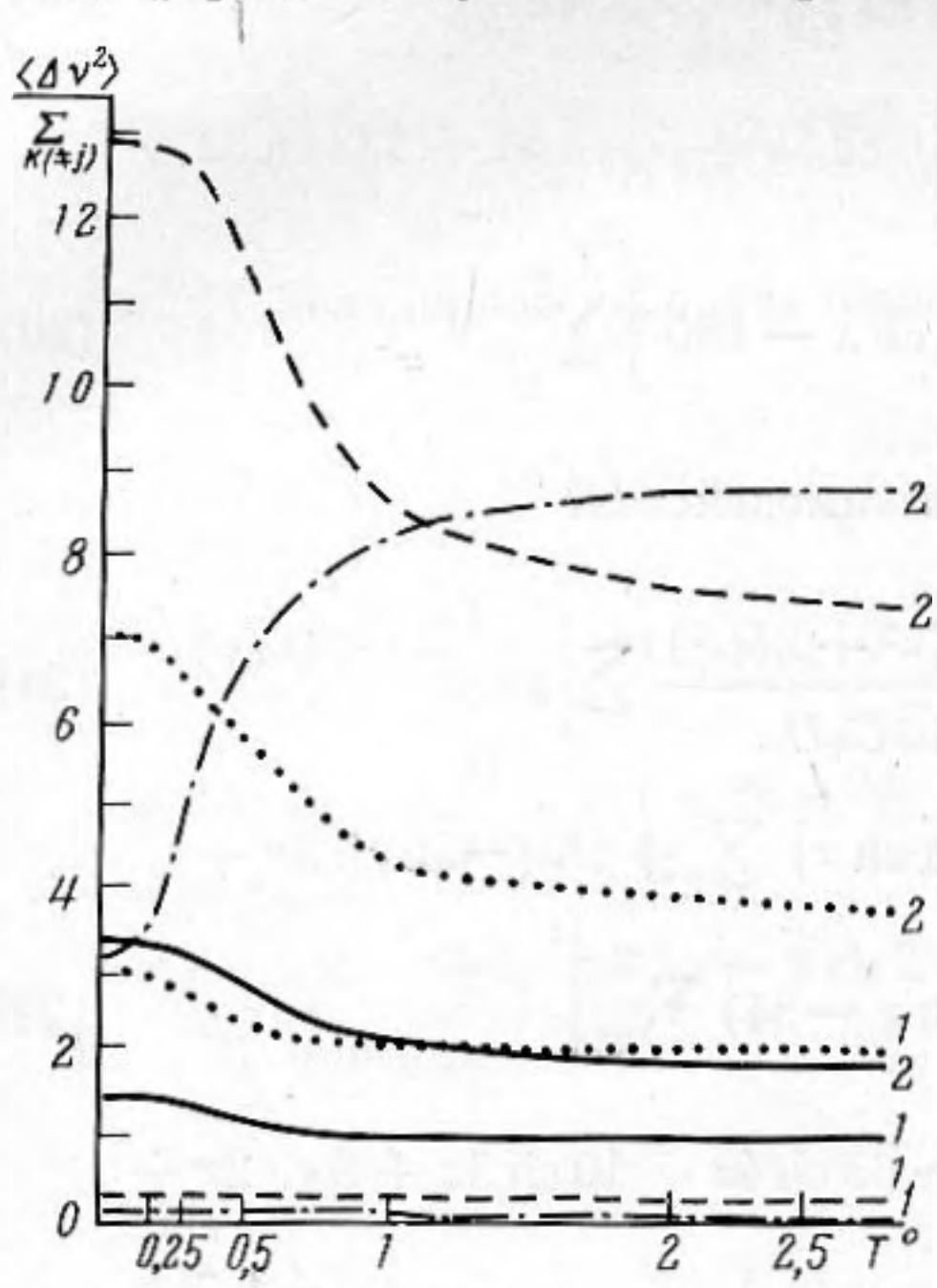
$$D_\pm = \mathrm{sh}\frac{x}{2} \pm \mathrm{sh}\frac{3x}{2}, \quad E = 3\,\mathrm{sh}\frac{x}{2} + \mathrm{sh}\frac{3x}{2}, \quad F = \mathrm{sh}\frac{x}{2} + 3\,\mathrm{sh}\frac{3x}{2},$$

$$\sum\nolimits^2_1 = \sum_{k(\neq j)} T_{20}^{jk}(R), \quad \sum\nolimits^2_2 = \sum_{k(\neq j)} T_{40}^{jk}(R), \quad \sum\nolimits^2_{11} = \sum_{k(\neq j)} T_{20}^{jk^2}(R),$$

$$\sum\nolimits^2_{22} = \sum_{k(\neq j)} T_{40}^{jk^2}(R), \quad \sum\nolimits^3_{11} = \sum_{k\neq l(\neq j)} T_{20}^{jk}(R)\,T_{20}^{kl}(R),$$

$$\sum\nolimits^3_{22} = \sum_{k\neq l(\neq j)} T_{40}^{jk}(R)\,T_{40}^{kl}(R).$$

Для удобства анализа результаты расчета представлены в графической форме; ввиду сложности расчета трехчастичных сумм учитывался только двухчастичный вклад в сдвиг и ширину линии. На фиг. 1 и 2 изображено поведение ширины и сдвига линии * акустического резонанса при низких температурах: на фиг. 1 приведена температурная зависимость ширины линии акустического резонанса ($H = 10^4$ *гс*, $g = 1$); на фиг. 2 — температурная зависимость сдвига линии акустического резонанса ($H = 10^4$ *гс*, $g = 1$).



Фиг. 1

Обозначения на фигурах следующие: сплошные кривые — диполь-дипольное взаимодействие, переход $n = 1$; пунктирные кривые — то же, но переход $n = 2$; штриховые кривые — квадруполь-квадрупольное взаимодействие, $n = 1$; штрих-пунктирные кривые — то же, но $n = 2$. Кривые с индексом *1* отвечают спину $s = 1$, с индексом *2* — спину $s = 3/2$.

На основании рассмотрения фиг. 1 и 2 можно сделать следующие выводы:

1. Диполь-дипольное взаимодействие (переходы $n = 1$ и $n = 2$). С понижением температуры ширина линии для спина $S = 3/2$ возрастает

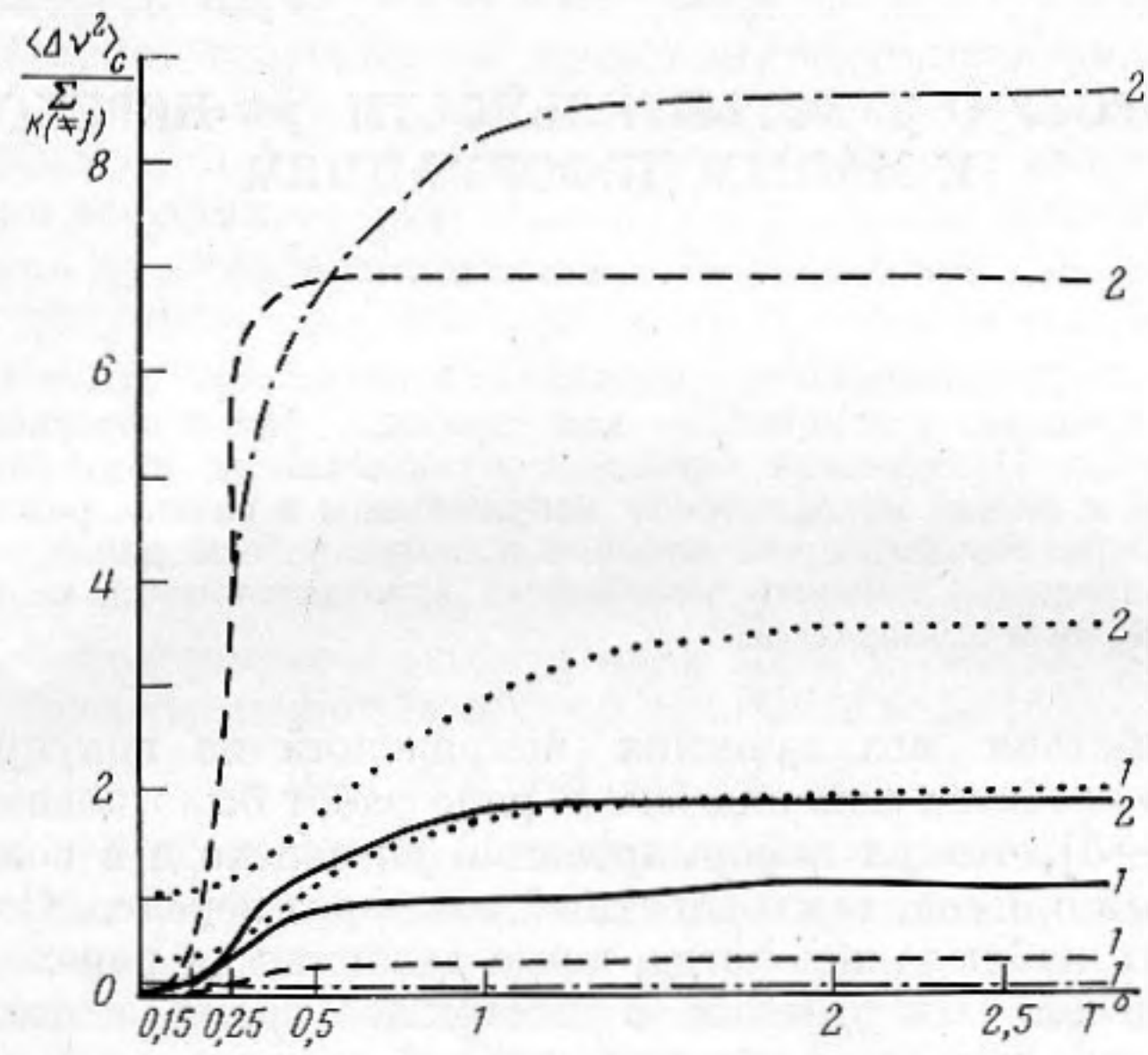
* Сдвиг линии означает ширину сдвинутой линии (с учетом смещения), сдвиг резонансной частоты определяется формулами $\langle D\nu \rangle$.

гораздо сильнее, чем при $S = 1$, а сдвиг, наоборот, для большого спина скорее уменьшается.

2. Квадруполь-квадрупольное взаимодействие.

а) переход $n = 1$: с понижением температуры возрастание ширины линии значительно сильнее для спина $S = {}^3/_2$, чем при $S = 1$. Для сдвига наблюдается резкое падение величины в случае спина $S = {}^3/_2$ и плавный спад при $S = 1$.

б) переход $n = 2$: с понижением температуры как ширина, так и сдвиг линии убывают для спина $S = {}^3/_2$ и возрастают для $S = 1$ (эта



Фиг. 2

закономерность может быть использована для отличия указанных типов взаимодействий).

3. В обоих случаях справедливо следующее: а) зависимость ширины и сдвига линии от температуры проявляется главным образом только при низких температурах в интервале 0,15—2° К для данного g); б) большему спину соответствуют большие значения ширины и сдвига линии.

Авторы весьма признательны У. Х. Копвиллему за ценные замечания и помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Г. Колоскова. Уширение резонансных линий квадруполь-квадрупольными взаимодействиями. Физ. метал и металлов., 1963, 15, 137—140.
2. В. М. Чернов и М. И. Пирожков. Двухчастичные сферические тензорные операторы и их применение в теории моментов кривой поглощения. ВИНИТИ, 1965, 56—65, Деп., 1—18.

Казанский физико-технический институт АН СССР

Поступила в редакцию 10 сентября 1965 г.