

На правах рукописи

Кутузов Александр Сергеевич

**МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И СПИНОВАЯ КИНЕТИКА
КОНДО-РЕШЁТОК И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КУПРАТОВ
С ИОНАМИ ИТТЕРБИЯ**

01.04.02 – Теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань – 2009

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Казанского государственного университета им. В.И. Ульянова-Ленина.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Кочелаев Борис Иванович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Жихарев Валентин Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор Таюрский Дмитрий Альбертович

Ведущая организация: Казанский физико-технический институт
им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН

Защита состоится 24 декабря 2009 г. в 14:30 на заседании диссертационного совета Д.212.081.15 при Казанском государственном университете по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке имени Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета.

Автореферат разослан ноября 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д. ф.-м. н., профессор

Ерёмин М. В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Тема предлагаемой вниманию читателя работы возникла на основе экспериментальных исследований ряда соединений редких земель с сильными электронными корреляциями методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). К первой группе таких веществ относятся так называемые кондо-решётки с тяжелыми фермионами. К этому классу веществ относится интерметаллическое соединение YbRh_2Si_2 , в котором в 2003 г. был обнаружен сигнал ЭПР на ионах иттербия группой д-ра Йорга Зихельшмидта в Институте Макса Планка химической физики твердых тел в Дрездене [1, 2]. Этот результат был большим сюрпризом для физики твердого тела, поскольку считалось, что магнитный момент иттербия должен быть экранирован электронами проводимости вследствие эффекта Кондо. Для понимания природы обнаруженного сигнала ЭПР и возможностей его использования для исследования необычных свойств кондо-решёток с тяжелыми фермионами возникла необходимость теоретического исследования магнитных свойств и спиновой кинетики родственных соединений YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 в области температур, при которых свойства тяжелых фермионов не соответствуют поведению ферми-жидкости Ландау.

Ко второй группе редкоземельных соединений, рассматриваемых в диссертации, относятся «родительские» вещества высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) со структурой $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ (YBCO). Метод ЭПР для исследования этих веществ стал применяться вскоре после открытия ВТСП (см. обзор [3]). В настоящее время такие исследования активно ведутся в Цюрихском университете группой А. Шенгелая под руководством К.А. Мюллера. Полученные недавно результаты с использованием ионов Yb^{3+} в качестве ЭПР-пробы (которые замещают ионы иттрия), поставили ряд новых задач для теории [4]. Выяснилось, что основным механизмом спиновой релаксации ионов иттербия в слабо допированных YBCO является спин-фононное взаимодействие. Однако, попытки использовать существующую теорию спин-решеточной релаксации, основанной на модели Дебая, оказались безуспешными. Для выяснения роли различных механизмов спиновой релаксации в высокотемпературных сверхпроводниках потребовалось детальное исследование спин-решеточной релаксации в родительских соединениях со структурой YBCO.

Цели работы и постановка задачи. Целью представленной работы является разработка теории магнитных свойств и спиновой кинетики кондо-решёток с тяжелыми фермионами и слабо допированных ВТСП соединений со структурой YBCO на основе модели локализованных состояний $4f$ -электронов. Были поставлены следующие задачи: 1) Найти энергетический спектр и собственные функции иона иттербия в тетрагональном кристаллическом электрическом поле; извлечь параметры кристаллического поля из имеющихся экспериментальных данных; 2) На основе решения предыдущей задачи вычислить статическую магнитную восприимчивость соединений YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 ; 3) Получить формулы для вклада спин-фононных взаимодействий в

ширину линии ЭПР; 4) Выйти за пределы модели Дебая в теории спин-решеточной релаксации; 5) Сравнить теоретические результаты с экспериментальными данными.

Научная новизна результатов. Показано, что температурная зависимость статической магнитной восприимчивости тяжелых фермионов в области температур и магнитных полей, соответствующей их не-фермижидкостному поведению, может быть успешно описана на основе модели локализованных f -электронов. При этом согласие с экспериментальными данными оказалось существенно лучше по сравнению с активно обсуждаемым в литературе обобщенным законом Кюри-Вейсса с дробными показателями, являющимся следствием возникновения квантовой критической точки [5]. Полученный результат указал на перспективность дальнейшего использования модели локализованных электронов для описания спиновой кинетики кондо-решёток на основе ренорм-группового анализа кондовского взаимодействия с широкозонными электронами проводимости [6].

Проведен сравнительный анализ вкладов в ширину линии ЭПР взаимодействия редкоземельных ионов с акустическими и оптическими фононами на основе простой модели колебаний трехмерной двухатомной решетки. Показано, что обычно используемая модель Дебая даёт совершенно неудовлетворительные результаты вследствие игнорирования особенностей плотности состояний, соотношения амплитуд и фаз различных атомов элементарной ячейки для состояний вблизи границ зоны Бриллюэна. Выяснено, что в широком диапазоне температур основную роль в спиновой релаксации играют оптические колебания решётки.

Научная и практическая значимость результатов работы определяется востребованностью полученных результатов для дальнейшего развития теории свойств веществ с сильными электронными корреляциями и прежде всего кондо-решёток с тяжелыми фермионами и высокотемпературных сверхпроводников и для адекватной интерпретации экспериментальных исследований этих веществ методом ЭПР.

Данные исследования проведены при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках программы «Развитие научного потенциала высшей школы» (контракт № 2.1.1/2985). Результаты работы использованы в научных отчетах по данной теме.

Личный вклад автора. Постановка задач принадлежит научному руководителю. Все решения задач, изложенные в диссертации, выполнены соискателем. Сравнение с экспериментальными результатами выполнялось совместно с научным руководителем и А.М. Скворцовой. Экспериментальные данные были любезно предоставлены группами Й. Зихельшмидта и А. Шенгелая.

Положения, выносимые на защиту:

1. Вычислена статическая магнитная восприимчивость соединений YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 для области фазовой диаграммы, соответствующей не-фермижидкостному поведению тяжелых фермионов, на основе модели локализованных $4f$ -электронов. Показано, что эта модель хорошо согласуется с экспериментальной температурной зависимостью магнитной восприимчивости в указанной области фазовой диаграммы.
2. Методом функций Грина получены формулы для вкладов в ширину линии ЭПР спин-фононного взаимодействия редкоземельных ионов с нечетным числом f -электронов для основного крамерсова дублета.
3. Показано, что вклад в ширину линии ЭПР оптических ветвей решеточных колебаний играет решающую роль в широком диапазоне температур, причем основную роль играют фононы с волновыми векторами вблизи границ зоны Бриллюэна. Этот вывод подтвержден анализом температурной зависимости ширины линии ЭПР иона Yb^{3+} в слабо-допированных купратах со структурой YBCO.

Апробация работы. Результаты работы были представлены на семинарах кафедры теоретической физики Казанского государственного университета; итоговых конференциях по научно-исследовательской деятельности за 2007 и 2008 гг.; VIII Научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета «Материалы и технологии XXI века», Казань, 28-29.10.2008; доложены на международных конференциях: «International conference on quantum criticality and novel phases», Дрезден, Германия, 2-5.08.2009; «International conference on strongly correlated electron Systems», Бузиос, Бразилия, 17–22.08.2008.

Публикации. Основное содержание работы опубликовано в 3 статьях и 3 тезисах конференций.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, пяти приложений, списка цитируемой литературы из 51 наименования. Работа изложена на 145 страницах, содержит 17 рисунков и 22 таблицы.

Краткое содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность выбранной темы, формулируется цель исследования и задачи, решаемые в диссертации, даётся общее описание работы и её составных частей.

Первая глава является обзорной и посвящена описанию основных свойств кондо-решёток с тяжелыми фермионами и слабо допированных соединений высокотемпературных сверхпроводников со структурой YBCO, которые в последние годы вызвали большой интерес. Обращено внимание на результаты исследований методом ЭПР с использованием ионов иттербия.

Приводятся основные черты теории спин-решёточной релаксации, основанной на модели Дебая для решёточных колебаний, и её недостатки.

Во **второй главе** найдено аналитическое решение задачи на собственные функции, энергетический спектр и g -факторы иона Yb^{3+} в тетрагональном

кристаллическом электрическом поле (КЭП), поскольку КЭП в кондо-решётках YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 и в слабодопированных ВТСП-купратах YBCO обладает именно такой симметрией. Результаты главы применимы к любым кристаллам, в которых ионы Yb^{3+} образуют тетрагональные центры.

Основная электронная конфигурация $4f^{13}$ свободного иона Yb^{3+} состоит только из одного термина 2F , расщеплённого спин-орбитальным взаимодействием на два мультиплета – основной ${}^2F_{7/2}$ и возбуждённый ${}^2F_{5/2}$. Так как интервал между ними порядка 1 эВ [7], что много больше расщепления в КЭП, можно рассматривать только основной мультиплет ${}^2F_{7/2}$, состояния которого обозначим $|JM_J\rangle \equiv |M_J\rangle$, где $J = 7/2$ – величина полного момента \mathbf{J} , M_J – собственное значение z -проекции J_z , ось z направим по тетрагональной оси КЭП. Гамильтониан взаимодействия иона Yb^{3+} с тетрагональным КЭП, записанный через эквивалентные операторы $O_l^m(\mathbf{J})$ [7, 8], имеет вид

$$V = \alpha B_2^0 O_2^0 + \beta (B_4^0 O_4^0 + B_4^4 O_4^4) + \gamma (B_6^0 O_6^0 + B_6^4 O_6^4), \quad (1)$$

где $\alpha = 2/63$, $\beta = -2/1155$, $\gamma = 4/27027$; B_l^m – параметры КЭП. Неприводимое двузначное представление $D^{7/2}$ группы вращений, по которому преобразуются волновые функции $|JM_J\rangle$ свободного иона иттербия, раскладывается на двумерные неприводимые представления Γ_7^t и Γ_6^t ($D^{7/2} = 2\Gamma_7^t + 2\Gamma_6^t$ [7]) двойной тетрагональной группы, относительно которой инвариантен оператор V . Следовательно, состояниями иона Yb^{3+} в тетрагональном КЭП являются четыре дублета (крамерсовы дублеты). Так как представления Γ_7^t и Γ_6^t входят в разложение $D^{7/2}$ по два раза каждое, то диагонализация матрицы оператора V восьмого порядка сводится к диагонализации двух матриц второго порядка, отвечающих неприводимым представлениям Γ_7^t и Γ_6^t . В таб. 1 приведены энергии E_k , состояния $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ и g -факторы крамерсовых дублетов; $g_J = 8/7$ – фактор Ланде. Дублеты помечены символами неприводимых представлений ${}^k\Gamma_6^t$ или ${}^k\Gamma_7^t$, где k – номер дублета. Проекция эффективного спина $\pm 1/2$ обозначены стрелками \uparrow, \downarrow и приписаны состояниям дублета так, что $\langle \uparrow | J_+ | \downarrow \rangle \neq 0$, где $J_+ = J_x + iJ_y$, а фазы выбраны так, что $\theta|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$, где θ – оператор обращения времени [7]. В этой таблице стрелка \uparrow (\downarrow) и левый (правый) индекс соответствуют верхнему (нижнему) знаку; $A = 4B_2^0/7 + 8B_4^0/77 + 80B_6^0/143$, $C = 4B_2^0/21 + 40B_4^0/77 - 560B_6^0/429$, $D = 2B_2^0/21 - 64B_4^0/77 - 160B_6^0/429$; Коэффициенты волновых функций дублетов симметрии Γ_6^t и Γ_7^t заданы угловыми параметрами φ_6 и φ_7 : $a_1 = \cos(\varphi_6/2)$, $a_2 = \sin(\varphi_6/2)$ и $c_1 = \cos(\varphi_7/2)$, $c_2 = \sin(\varphi_7/2)$, которые выражаются через параметры КЭП посредством формул

$$\text{tg } \varphi_6 = -\frac{2}{3} \sqrt{\frac{39B_4^4 - 50B_6^4}{143B_2^0 + 26B_4^0 + 140B_6^0}}, \quad \text{tg } \varphi_7 = -\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{117B_4^4 + 70B_6^4}{143B_2^0 + 390B_4^0 - 980B_6^0} \right).$$

Оператор зеемановской энергии $g_J \mu_B \mathbf{HJ}$ в базисе $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ каждого дублета представляется матрицей

$$H_{Zeeman} = g_{\parallel} \mu_B H_z S_z + g_{\perp} \mu_B (H_x S_x + H_y S_y), \quad (2)$$

где $g_{\parallel} = 2g_J \langle \uparrow | J_z | \uparrow \rangle$, $g_{\perp} = g_J \langle \uparrow | J_+ | \downarrow \rangle$, μ_B – магнетон Бора, \mathbf{S} – оператор эффективного спина 1/2 дублета. Так как g -факторы каждого дублета зависят только от одного параметра φ_6 или φ_7 (таб. 1), то его можно исключить и найти уравнение, связывающее g_{\parallel} и g_{\perp} . На рис. 1 представлена диаграмма g -факторов. Сплошная и штрихованная части линии $g_{\parallel} + 2g_{\perp} + 7g_J = 0$ соответствуют дублетам ${}^4\Gamma'_6$ и ${}^3\Gamma'_6$, а сплошная и штрихованная части эллипса $(g_{\parallel} - g_J)^2/4 + g_{\perp}^2/3 = 4g_J^2$ отвечают дублетам ${}^2\Gamma'_7$ и ${}^1\Gamma'_7$ соответственно. Линия и эллипс касаются в точке $(-g_J, -3g_J)$, которая отмечена черточкой.

Таб. 1 Энергии, волновые функции и g -факторы иона Yb^{3+} в тетрагональном кристаллическом электрическом поле.

$E_{1,2}(\Gamma'_7) = -D \pm C / \cos \varphi_7$	$E_{3,4}(\Gamma'_6) = D \pm A / \cos \varphi_6$
$ \Gamma'_7 \uparrow, \downarrow\rangle = \pm c_1 \pm 5/2\rangle \pm c_2 \mp 3/2\rangle$	$ \Gamma'_6 \uparrow, \downarrow\rangle = \pm a_1 \mp 7/2\rangle \pm a_2 \pm 1/2\rangle$
$ \Gamma'_7 \uparrow, \downarrow\rangle = \mp c_2 \pm 5/2\rangle \pm c_1 \mp 3/2\rangle$	$ \Gamma'_6 \uparrow, \downarrow\rangle = \mp a_2 \mp 7/2\rangle \pm a_1 \pm 1/2\rangle$
$g_{\parallel}({}^{1,2}\Gamma'_7) = g_J(1 \pm 4 \cos \varphi_7)$	$g_{\parallel}({}^{3,4}\Gamma'_6) = -g_J(3 \pm 4 \cos \varphi_6)$
$g_{\perp}({}^{1,2}\Gamma'_7) = \mp 2\sqrt{3}g_J \sin \varphi_7$	$g_{\perp}({}^{3,4}\Gamma'_6) = -2g_J(1 \mp \cos \varphi_6)$

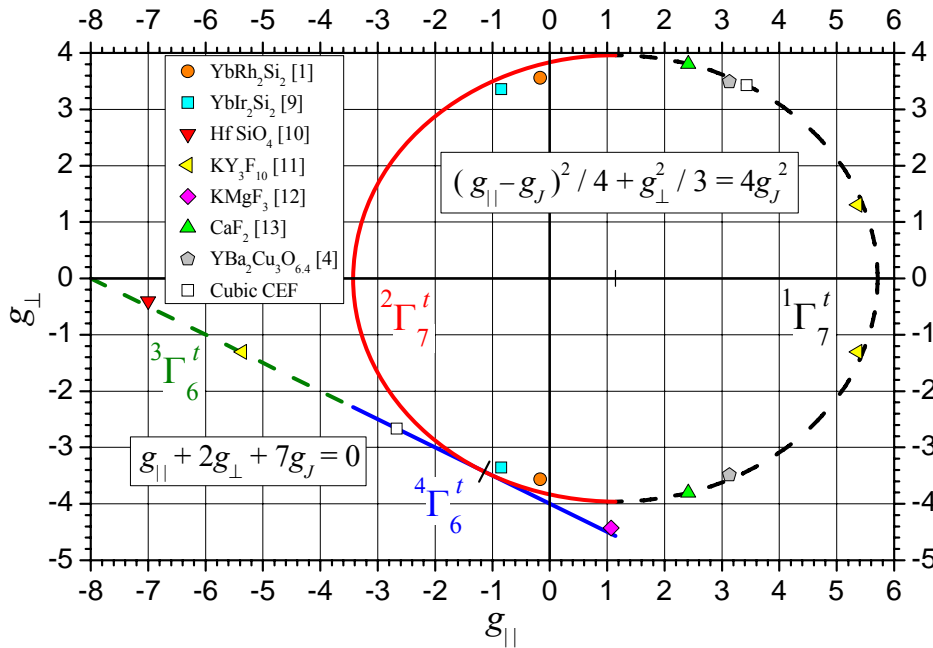


Рис. 1 Диаграмма g -факторов иона Yb^{3+} в тетрагональном КЭП и экспериментальные g -точки, взятые из литературы.

На g -диаграмме (рис. 1) в качестве иллюстрации отмечены известные в литературе из экспериментов по ЭПР g -факторы иона Yb^{3+} в некоторых

кристаллах. Эта диаграмма позволяет по измеряемым в эксперименте модулям g -факторов судить о нижнем крамерсовом дублете и указать возможные знаки g -факторов. Так, сразу видно, что основным состоянием иона Yb^{3+} в кристалле HfSiO_4 является дублет ${}^3\Gamma'_6$, и знаки обоих g -факторов отрицательны. Основным дублетом Yb^{3+} в кристалле KMgF_3 является ${}^4\Gamma'_6$, знак g_{\parallel} положительный, а знак g_{\perp} отрицательный. Не вызывает сомнений, что в кристаллах CaF_2 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$ тетрагональные центры иона Yb^{3+} находятся в состоянии ${}^1\Gamma'_7$, и знак g_{\parallel} положительный, однако g_{\perp} может быть как отрицательным так и положительным, поэтому на рис. 1 отмечены две точки. Такова же ситуация со знаком g_{\perp} в кристаллах YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 , если основным состоянием иона Yb^{3+} является дублет ${}^2\Gamma'_7$. Отклонение экспериментальных точек от теоретических кривых по-видимому связано с обменным взаимодействием $4f$ -электронов иона Yb^{3+} с электронами проводимости в YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 (см. ниже). Не зная величины вклада этого взаимодействия в значения g -факторов, дублет ${}^4\Gamma'_6$ надо тоже рассматривать в качестве возможного основного. В кристалле KY_3F_{10} g -факторы оказались таковы, что нижним состоянием может быть либо дублет ${}^3\Gamma'_6$, либо ${}^1\Gamma'_7$. Знание знака g_{\parallel} позволило бы в данном случае определить нижний дублет, но для этого следовало бы измерять ЭПР в поляризованном по кругу переменном магнитном поле [7].

Часто из эксперимента по неупругому рассеянию нейтронов известны энергии $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$ возбуждённых дублетов иона иттербия относительно основного дублета. В работе удалось аналитически найти все наборы параметров тетрагонального КЭП, которые в точности воспроизводят любую заданную энергетическую схему иона Yb^{3+} :

$$B_2^0 = \frac{1}{8}b + \frac{3}{4}b_6 \cos \varphi_6 + \frac{1}{4}b_7 \cos \varphi_7, \quad (3)$$

$$B_4^0 = -\frac{1}{4}b + \frac{1}{32}b_6 \cos \varphi_6 + \frac{5}{32}b_7 \cos \varphi_7, \quad B_4^4 = -\frac{7\sqrt{35}}{32}b_6 \sin \varphi_6 - \frac{35\sqrt{3}}{32}b_7 \sin \varphi_7,$$

$$B_6^0 = -\frac{13}{160}b + \frac{39}{320}b_6 \cos \varphi_6 - \frac{91}{320}b_7 \cos \varphi_7, \quad B_6^4 = \frac{117\sqrt{35}}{320}b_6 \sin \varphi_6 - \frac{273\sqrt{3}}{320}b_7 \sin \varphi_7,$$

Таб. 2 Величины b , b_6 и b_7 в выражениях (3).

Нижний дублет	b	b_6	b_7
${}^1\Gamma'_7$	$E_{31} - E_{21} + E_{41}$	$E_{31} - E_{41}$	$-E_{21}$
${}^2\Gamma'_7$	$E_{32} - E_{12} + E_{42}$	$E_{32} - E_{42}$	E_{12}
${}^3\Gamma'_6$	$E_{43} - E_{13} - E_{23}$	$-E_{43}$	$E_{13} - E_{23}$
${}^4\Gamma'_6$	$E_{34} - E_{14} - E_{24}$	E_{34}	$E_{14} - E_{24}$

где величины b , b_6 и b_7 зависят от энергий E_{mk} дублетов отсчитанных от нижнего дублета (таб. 2). При использовании выражений (3) надо выбрать основной дублет E_k и расположение возбуждённых дублетов, чтобы выразить соответствующие

разности E_{mk} в таб. 2 через экспериментальные энергии $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$. Угловые параметры φ_6 и φ_7 остаются неопределёнными и могут принимать в (3) любые значения из интервала $-\pi/2 \leq \varphi_6, \varphi_7 \leq \pi/2$ независимо друг от друга, энергетическая схема от них не зависит. Для определения значений φ_6 и φ_7 необходимо использовать другие экспериментальные данные. Так, знание экспериментальных значений g -факторов нижнего дублета при помощи g -диаграммы (рис. 1) может помочь определить нижний дублет и значение одного угла: φ_7 в случае нижнего дублета симметрии Γ_7' или φ_6 в случае нижнего дублета симметрии Γ_6' (таб. 1). Таким образом, экспериментальных энергий и g -факторов недостаточно для однозначного определения параметров КЭП, ибо один из углов φ_6 или φ_7 в (3) остаётся произвольным. При определённых значениях φ_6 и φ_7 формулы (3) дают известные из литературы параметры КЭП для кристаллов YbRh_2Si_2 [14, 15], YbIr_2Si_2 [15], которые были найдены методом наименьших квадратов (то есть отыскивались параметры, дающие наилучшее совпадение рассчитанных численной диагонализацией матрицы (1) уровней энергии возбуждённых дублетов и g -факторов основного дублета с соответствующими экспериментальными величинами). Теперь понятно, что к найденным таким методом параметрам КЭП следует относиться с настороженностью, ибо процедура наименьших квадратов может сойтись к набору параметров КЭП, соответствующих некому случайному значению того угла φ_6 или φ_7 , который не определяется по значениям g -факторов.

В третьей главе вычислена статическая магнитная восприимчивость металлов с тяжёлыми фермионами (ТФ) YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 на основе модели локализованных $4f$ -электронов. На рис. 2 приведена фазовая диаграмма, показывающая границу перехода между состояниями от антиферромагнитного порядка (AF) к парамагнитному ферми-жидкостному металлу (LFL) в зависимости от магнитного поля при температуре $T = 0$ К (так называемая квантовая критическая точка – QCP) и переход из этих состояний при повышении температуры в парамагнитный металл, не обладающий свойствами ферми-жидкости Ландау (NFL): в частности, сопротивление растёт линейно с температурой. В настоящее время, несмотря на значительные усилия теоретиков, отсутствует общепринятая теория этих фазовых превращений.

Согласно одной из известных моделей тяжелых фермионов QCP возникает в результате конкуренции локального Кондо взаимодействия и косвенного спин-спинового взаимодействия через электроны проводимости [16, 5]. Характерным следствием этой модели является обобщенный закон Кюри-Вейсса для температурной зависимости статической магнитной восприимчивости:

$$\chi_{QCP} = \frac{C}{T^\alpha + \theta^\alpha} \quad (4)$$

с $\alpha < 1$. Такой тип поведения восприимчивости с $\alpha = 0.75$ и $\theta = 0$ был найден впервые в соединении $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$ [5, 17], а также в YbRh_2Si_2 с $\alpha = 0.6$ [18] (рис. 4).

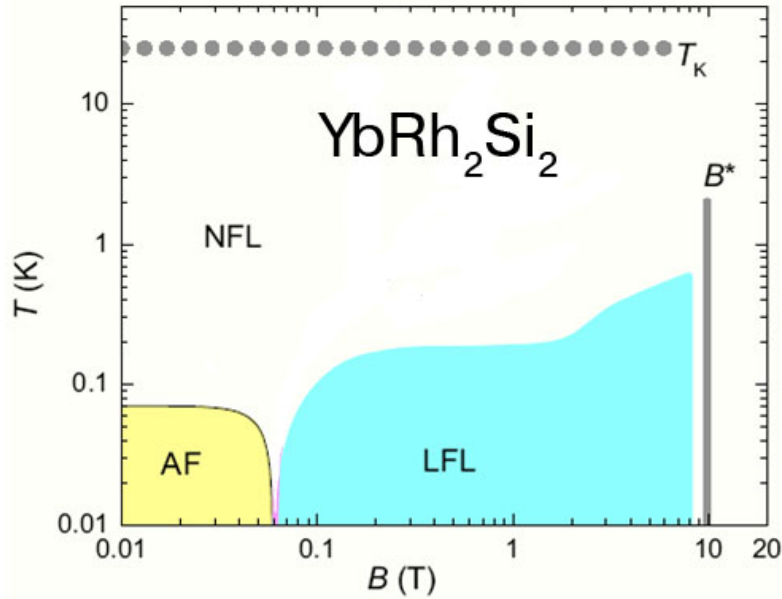


Рис. 2 Фазовая диаграмма YbRh_2Si_2 ($B \perp c$).

С другой стороны, многие свойства обнаруженного резонанса в этом металле имеют больше сходства с сигналом ЭПР локализованных f -электронов, чем обычных носителей тока. В частности, на это указывает температурная зависимость интенсивности сигнала ЭПР, которая должна быть пропорциональна статической магнитной восприимчивости: паулиевская восприимчивость носителей тока от температуры не зависит, в то время как интенсивность сигнала ЭПР зависит от температуры Кюри-Вейсс-подобным образом. Более того, угловая зависимость резонансного магнитного поля отражает тетрагональную симметрию КЭП в позиции иона Yb^{3+} с сильно анизотропным g -фактором $g = \sqrt{g_{\parallel}^2 \cos^2 \phi + g_{\perp}^2 \sin^2 \phi}$, где $|g_{\parallel}| = 0.17$, $|g_{\perp}| = 3.561$, а ϕ – угол между магнитным полем и тетрагональной осью c симметрии кристалла. Позднее сигнал ЭПР с аналогичными свойствами был обнаружен также в YbIr_2Si_2 [9].

На основе вышеизложенных свойств сигнала ЭПР, возник интерес выяснить, насколько приемлем подход полностью локализованных f -электронов для не-ферми-жидкостной области фазовой диаграммы с точки зрения магнитной восприимчивости. Группой Й. Зихельшмидта измерена статическая магнитная восприимчивость YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 (I-type) в интервале температур 2 – 30 К. Для анализа эксперимента рассчитана парамагнитная восприимчивость ионов иттербия в этих кристаллах.

Намагниченность кристалла с концентрацией n ионов Yb^{3+} равна $n\langle \mathbf{M} \rangle$, где $\mathbf{M} = -\mu_B g_J \mathbf{J}$ – оператор магнитного момента иона иттербия; среднее значение $\langle M_i \rangle = \text{Sp}(\rho M_i)$ ($i = x, y, z$) вычисляется с матрицей плотности $\rho = \exp(-\beta H) / Z$, где $Z = \text{Sp}[\exp(-\beta H)]$, $\beta = 1 / (k_B T)$, и гамильтонианом $H = V - \mathbf{M}\mathbf{H}$, в котором V – гамильтониан иона Yb^{3+} в тетрагональном КЭП (1), \mathbf{H} – магнитное поле, T – температура. Статическая магнитная восприимчивость даётся выражением

$$\chi_{ij} = n \frac{\partial \langle M_i \rangle}{\partial H_j} \Big|_{\mathbf{H}=0} = n \int_0^\beta \langle M_i M_j(\lambda) \rangle_0 d\lambda, \quad (5)$$

где $M_i(\lambda) = \exp(-\lambda V) M_i \exp(\lambda V)$, среднее $\langle \dots \rangle_0$ вычисляется с гамильтонианом V вместо H . Из экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов известны энергии возбужденных дублетов $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$ отсчитанные относительно основного уровня, а именно: 17, 25, 43 мэВ для YbRh_2Si_2 [19] и 18, 25, 36 мэВ для YbIr_2Si_2 [20]. При температурах эксперимента применимо приближение низких температур, когда $\exp[-\Delta_{1,2,3}/k_B T] \ll 0$ (1 мэВ \sim 11.64 К), и восприимчивость определяется двумя вкладками $\chi_{ij} = \chi_{ij}^K + \chi_{ij}^{B\Phi}$, где первый представляет собой закон Кюри

$$\chi_{ij}^K = (n\beta/2)(g_J\mu_B)^2 \sum_{\alpha\alpha'} \langle k\alpha | J_i | k\alpha' \rangle \langle k\alpha' | J_j | k\alpha \rangle = C_{ij}/T, \quad (6)$$

а второй – независящую от температуры восприимчивость Ван Флека

$$\chi_{ij}^{B\Phi} = n(g_J\mu_B)^2 \sum_{\substack{m(\neq k) \\ \alpha\alpha'}} \frac{\langle k\alpha | J_i | m\alpha' \rangle \langle m\alpha' | J_j | k\alpha \rangle}{E_m - E_k}. \quad (7)$$

Здесь для состояний дублетов введены краткие обозначения $|{}^m\Gamma'_{6,7} \alpha\rangle \equiv |m\alpha\rangle$, где $\alpha = \uparrow, \downarrow$, а m – номер дублета из таб. 1. При вычислении оказывается $\chi_{xz} = \chi_{yz} = \chi_{xy} = 0$ и $\chi_{xx} = \chi_{yy} \equiv \chi_\perp$, что очевидно для тетрагональной симметрии; положим также $\chi_{zz} \equiv \chi_\square$, $C_{zz} \equiv C_\square$, $C_{xx} = C_{yy} \equiv C_\perp$. Рассматривая два возможных нижних дублета (рис. 1) получаем для констант Кюри из (6) $C_{\square,\perp} = n(\mu_B g_{\square,\perp})^2/4$, для $\chi_{\square,\perp}^{B\Phi}$ и нижнего дублета ${}^2\Gamma'_7$ имеем

$$\chi_\square^{B\Phi} = 32n(\mu_B g_J)^2 \frac{c_1^2 c_2^2}{E_1 - E_2}, \quad (8)$$

$$\chi_\perp^{B\Phi} = n(\mu_B g_J)^2 \left[\frac{6(c_1^2 - c_2^2)^2}{E_1 - E_2} + \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{7}c_2 a_1 - \sqrt{15}c_1 a_2)^2}{E_3 - E_2} + \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{7}c_2 a_2 + \sqrt{15}c_1 a_1)^2}{E_4 - E_2} \right],$$

для нижнего дублета ${}^4\Gamma'_6$ получаем

$$\chi_\square^{B\Phi} = 32n(\mu_B g_J)^2 \frac{a_1^2 a_2^2}{E_3 - E_4}, \quad (9)$$

$$\chi_\perp^{B\Phi} = n(\mu_B g_J)^2 \left[\frac{8a_1^2 a_2^2}{E_3 - E_4} + \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{7}c_1 a_2 - \sqrt{15}c_2 a_1)^2}{E_1 - E_4} + \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{7}c_2 a_2 + \sqrt{15}c_1 a_1)^2}{E_2 - E_4} \right].$$

Таб. 3 Расчитанные значения константы Кюри C (10^{-6} м³моль⁻¹К) и восприимчивости Ван Флека χ^{VV} (10^{-6} м³моль⁻¹)

Кристалл	Нижний дублет	C_{\perp}	χ_{\perp}^{VV}	C_{\square}	χ_{\square}^{VV}
YbRh ₂ Si ₂	² Γ ₇ '	16.8	0.087 – 0.202	0.062	0.09 – 0.227
	⁴ Γ ₆ '	17.4	0.107 – 0.237	0.115	0.053 – 0.134
YbIr ₂ Si ₂	² Γ ₇ '	14.7	0.121 – 0.215	1.02	0.094 – 0.187
	⁴ Γ ₆ '	14.7	0.127 – 0.224	1.04	0.083 – 0.166

Т.к. по экспериментальным значений g -факторов определяется только один угол φ_6 или φ_7 (таб. 1), а изменение второго в диапазоне $(-\pi/2, \pi/2)$ не влияет на энергетическую схему $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$, то результат расчёта восприимчивости Ван Флека приведён в таб. 3 для всех возможных значений этого угла, а также для всех возможных вариантов расположения возбуждённых дублетов из таб. 1 на экспериментальной энергетической схеме $\Delta_1 < \Delta_2 < \Delta_3$.

Поскольку в YbRh₂Si₂ g_{\parallel} меньше g_{\perp} примерно в 20 раз, то закон Кюри и восприимчивость Ван Флека играют существенно разную роль при параллельной и перпендикулярной ориентации магнитного поля: константа Кюри C_{\perp} в перпендикулярной ориентации как минимум на два порядка больше таковой C_{\square} в параллельной ориентации, в то время как восприимчивости Ван Флека χ_{\perp}^{VV} и χ_{\square}^{VV} одного порядка (см. таб. 3). Это означает, как видно на рис. 3а, что в перпендикулярной ориентации основной вклад в восприимчивость даёт закон Кюри, а в параллельной ориентации восприимчивость в гораздо меньшей степени зависит от температуры и определяется восприимчивостью Ван Флека. Для YbIr₂Si₂ ситуация другая: поскольку g -факторы отличаются только в 4 раза, константы Кюри C_{\perp} и C_{\square} отличаются только на один порядок, а вклады Ван Флека практически такие же как и в YbRh₂Si₂ (таб. 3).

Для описания температурной зависимости магнитной восприимчивости металлов YbRh₂Si₂ и YbIr₂Si₂ нужно еще учесть взаимодействие ионов иттербия с электронами проводимости. Хотя восприимчивость Паули пренебрежимо мала, но полная восприимчивость перенормируется в результате обменного взаимодействия $4f$ -электронов ионов Yb³⁺ с электронами проводимости (кондо-взаимодействие), которое после проектирования на нижний крамерсов дублет становится сильно анизотропным

$$H_{\text{int}} = -\sum_i \left\{ J_{s\sigma}^{\perp} \left[S_i^x \sigma^x(\mathbf{r}_i) + S_i^y \sigma^y(\mathbf{r}_i) \right] + J_{s\sigma}^{\square} S_i^z \sigma^z(\mathbf{r}_i) \right\}, \quad (10)$$

и РККИ-взаимодействия между ионами Yb³⁺ через электроны проводимости. В H_{int} \mathbf{S} – оператор эффективного спина 1/2 нижнего дублета, $\sigma(\mathbf{r}_i)$ – оператор

спиновой плотности электронов на ионе Yb^{3+} с радиус-вектором \mathbf{r}_i , $J_{\square,\perp}^{\square,\perp}$ – обменные интегралы. Результат перенормировки вследствие учёта кондо- и РККИ-взаимодействий в приближении молекулярного поля подобно изотропному случаю можно записать [21, 22, 23] так

$$\chi_{\square,\perp}^{tot} = \frac{\tilde{C}_{\square,\perp}}{T + \theta_{\square,\perp}} + \chi_{\square,\perp}^{VV}, \quad \tilde{C}_{\square,\perp} = C_{\square,\perp} (1 + 2\lambda_{\square,\perp} \chi_{\sigma}^0), \quad \lambda_{\square,\perp} = \frac{J_{s\sigma}^{\square,\perp}}{g_{\square,\perp} g_{\sigma} \mu_B^2}, \quad (11)$$

где χ_{σ}^0 – восприимчивость Паули, $\lambda_{\square,\perp}$ – константа молекулярного поля, $g_{\square,\perp}$ – g -фактор ионов Yb^{3+} , а g_{σ} – g -фактор электронов проводимости. В (11) температурнозависящая часть имеет форму закона Кюри-Вейсса с температурой Вейсса θ . На рисунках 3а,б (стр. 14) сплошными линиями представлен результат подгонки экспериментальных данных по первому выражению в (11), параметры подгонки $\tilde{C}_{\square,\perp}$, $\theta_{\square,\perp}$ и $\chi_{\square,\perp}^{VV}$ приведены в таблице 4 (стр. 14). Видно, что закон «Кюри-Вейсс + Ван Флек» прекрасно описывает температурную зависимость магнитной восприимчивости YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 . Сравнение рассчитанных парамагнитных констант Кюри $C_{\square,\perp}$ (таб. 3) с извлечёнными из подгонки экспериментальных данных $\tilde{C}_{\square,\perp}$ (таб. 4) показывает, что, как и ожидалось в соответствии с (11), последние уменьшаются вследствие антиферромагнитного знака обменного взаимодействия ($J^{\square,\perp} < 0$).

На рис. 4 представлены экспериментальные данные по восприимчивости, любезно предоставленные авторами работы [18], и результаты подгонки по формуле (11) и степенному закону $T^{-0.6}$ из [18]. Как видно закон «Кюри-Вейсс + Ван Флек» лучше описывает эксперимент, чем обобщённый закон Кюри-Вейсса (4).

Отметим ещё, что отличие экспериментально наблюдаемых g -факторов для ионов Yb^{3+} от предсказываемых теорией КЭП (см. рис. 1) также объясняется кондо-взаимодействием f -электронов с электронами проводимости (10), что для наблюдаемого g -фактора даёт выражение [21, 22]

$$g_{\square,\perp}^{eff} = g_{\square,\perp} (1 + \lambda_{\square,\perp} \chi_{\sigma}^0), \quad (12)$$

где $g_{\square,\perp}$ – ионные g -факторы в теории КЭП, и приводит к уменьшению наблюдаемой величины эффективного g -фактора в силу антиферромагнитного знака обменного взаимодействия ($J^{\square,\perp} < 0$).

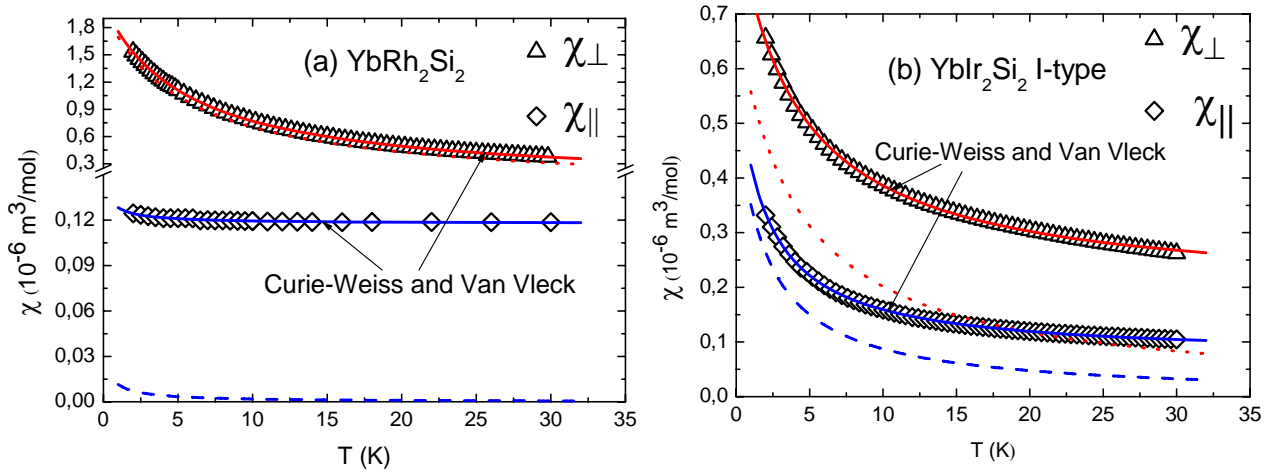


Рис. 3 Статическая магнитная восприимчивость (a) YbRh_2Si_2 при параллельной ($H = 10 \text{ kG}$) и перпендикулярной ($H = 11.2 \text{ kG}$) ориентации магнитного поля (масштаб для χ_{\square} и χ_{\perp} различен) и (b) YbIr_2Si_2 I-type ($H = 10 \text{ kG}$). Сплошные линии – подгонка по формуле (11), параметры которой приведены в таб. 4. Вклад Кюри-Вейса в (11) показан отдельно пунктирной и штрихованной линиями.

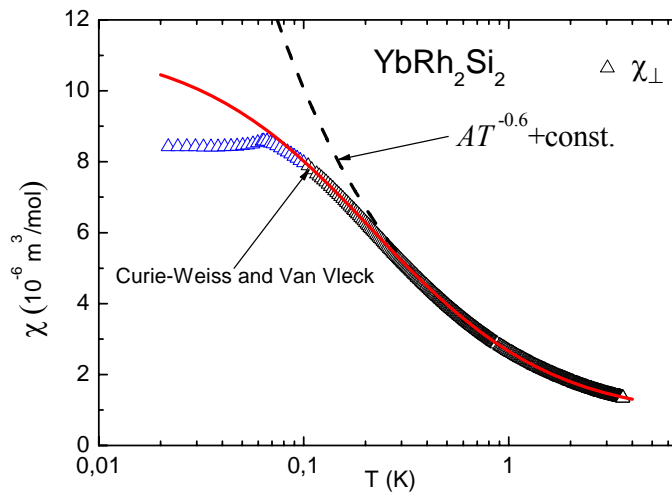


Рис. 4 Магнитная восприимчивость YbRh_2Si_2 , измеренная в работе [18]. Штрихованная линия – подгонка по формуле (4) в работе [18]. Сплошная линия – подгонка по формуле (11), параметры приведены в таб. 4.

Таб. 4 Значения константы Кюри \tilde{C} ($10^{-6} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1} \text{ К}$), восприимчивости Ван Флека χ^{VV} ($10^{-6} \text{ м}^3 \text{ моль}^{-1}$) и температуры Кюри-Вейса (К), полученные подгонкой экспериментальных данных на рис. 3a,b и 4 по формуле (11).

Кристалл	T	\tilde{C}_{\perp}	χ_{\perp}^{VV}	θ_{\perp}	\tilde{C}_{\square}	χ_{\square}^{VV}	θ_{\square}
YbRh_2Si_2	2 – 30	10.89	0.064	5.43	0.02	0.12	0.76
	0.02 – 3.6	2.31	0.75	0.22	–	–	–
YbIr_2Si_2	2 – 30	2.84	0.18	4.1	1.04	0.07	1.98

В четвёртой главе рассмотрено взаимодействие крамерсова иона с фононами, обусловленное модуляцией кристаллического поля колебаниями решётки [7, 8]. Проектированием на нижний крамерсов дублет получен эффективный гамильтониан спин-фононного взаимодействия $H_{int} = H_{int}^{(1)} + H_{int}^{(2)}$, где однофононная часть имеет вид

$$H_{int}^{(1)} = \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left[b_{\mathbf{q}\lambda} C_1'(\mathbf{q}\lambda) + b_{\mathbf{q}\lambda}^+ C_1'^*(\mathbf{q}\lambda) \right] S_z + \quad (13)$$

$$+ \left[b_{\mathbf{q}\lambda} A_{1-}'(\mathbf{q}\lambda) + b_{\mathbf{q}\lambda}^+ A_{1+}'(\mathbf{q}\lambda) \right] S_+ + \left[b_{\mathbf{q}\lambda}^+ A_{1-}'^*(\mathbf{q}\lambda) + b_{\mathbf{q}\lambda} A_{1+}'^*(\mathbf{q}\lambda) \right] S_-,$$

а двухфононная такова

$$H_{int}^{(2)} = \sum_{\mathbf{q}\lambda \mathbf{q}'\lambda'} b_{\mathbf{q}'\lambda'}^+ b_{\mathbf{q}\lambda} \left[C_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda) S_z + A_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda) S_+ + A_2'^*(\mathbf{q}\lambda, \mathbf{q}'\lambda') S_- \right]. \quad (14)$$

Здесь $b_{\mathbf{q}\lambda}^+$ и $b_{\mathbf{q}\lambda}$ – операторы рождения и уничтожения фонона с волновым вектором \mathbf{q} из частотной ветви λ , \mathbf{S} – оператор эффективного спина 1/2 нижнего крамерсова дублета, а выражения для величин $C_1'(\mathbf{q}\lambda)$, $A_{1\pm}'(\mathbf{q}\lambda)$, $C_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)$, $A_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)$ приведены в диссертации. Гамильтониан получен для тетрагонального КЭП и произвольно направленного постоянного магнитного поля. Однофононная часть $H_{int}^{(1)}$ зависит посредством $C_1'(\mathbf{q}\lambda)$ и $A_{1\pm}'(\mathbf{q}\lambda)$ от величины и направления магнитного поля, а двухфононная $H_{int}^{(2)}$ посредством $C_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)$ и $A_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)$ от направления магнитного поля.

Методом функций Грина была вычислена мнимая часть массового оператора $M(\omega)$, которая определяет ширину Γ линии ЭПР:

$$\Gamma = -\text{Im} M(\omega_0 + i0) = \frac{1}{\hbar^2} \text{Im} \langle \langle [S_-, H_{int}] | [S_+, H_{int}] \rangle \rangle_{\omega_0 + i0}^\circ \equiv \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_2', \quad (15)$$

где ω_0 – резонансная частота. Вклад Γ_1 , обусловленный однофононными процессами, равен

$$\Gamma_1 = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}\lambda} |A_{1-}'(\mathbf{q}\lambda)|^2 (2n_{\mathbf{q}\lambda} + 1) \delta(\omega_{\mathbf{q}\lambda} - \omega_0). \quad (16)$$

Вклад Γ_2 , обусловленный двухфононными процессами с переворотом эффективного спина нижнего крамерсова дублета, имеет вид

$$\Gamma_2 = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda} |A_2'(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)|^2 [n_{\mathbf{q}'\lambda'}(n_{\mathbf{q}\lambda} + 1) + n_{\mathbf{q}\lambda}(n_{\mathbf{q}'\lambda'} + 1)] \delta(\omega_0 - \omega_{\mathbf{q}\lambda} + \omega_{\mathbf{q}'\lambda'}), \quad (17)$$

а вклад Γ_2' , отвечающий процессам без переворота эффективного спина, таков

$$\Gamma'_2 = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda} |C'_2(\mathbf{q}'\lambda', \mathbf{q}\lambda)|^2 n_{\mathbf{q}\lambda} (n_{\mathbf{q}\lambda} + 1) \delta(\omega_{\mathbf{q}'\lambda'} - \omega_{\mathbf{q}\lambda}). \quad (18)$$

где $n(\omega_{\mathbf{q}\lambda})$ – функция Бозе-Эйнштейна.

Найдена угловая зависимость двухфононного вклада в ширину линии в модели Дебая:

$$\Gamma_2^{total} = \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta'\right) \Gamma_2(\theta = 0) + \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta'\right) \Gamma'_2(\theta = 0), \quad (19)$$

где θ – угол между направлением магнитного поля и тетрагональной осью;

$\sin \theta' = \frac{|g_{\perp}|}{g(\theta)} \sin \theta$, $g(\theta) = \sqrt{(g_{\square} \cos \theta)^2 + (g_{\perp} \sin \theta)^2}$; $\Gamma_2(\theta = 0)$ и $\Gamma'_2(\theta = 0)$ –

вклады, соответственно, от процессов с переворотом и без переворота спина в магнитном поле, параллельном тетрагональной оси. Показано, что в случае кубического КЭП $\Gamma_2(\theta = 0)$ и $\Gamma'_2(\theta = 0)$ совпадают, и зависимость Γ_2^{total} от θ исчезает.

В пятой главе для исследования принципиальной стороны вопроса о роли оптических колебаний в спин-решёточной релаксации рассмотрена модель решёточных колебаний двухатомного кристалла со структурой NaCl, которая позволила рассчитать вклады в скорость релаксации, обусловленные акустическими и оптическими модами, сравнить их между собой и с расчётами в модели Дебая. Предполагалось, что примесный ион иттербия Yb^{3+} замещает тяжёлый атом и его релаксация обусловлена модуляцией КЭП колебаниями ближайших лёгких атомов (в частности, в YBCO иттербий замещает иттрий, расположенный между плоскостями CuO_2 ; его ближайшим окружением являются восемь атомов кислорода, масса которых в четыре раза меньше атомов меди и во много раз массы самого иттербия). Для определённости массы атомов в модельном кристалле брались такие же, как для меди и кислорода. На рис. 5 представлены температурные зависимости вкладов в скорость релаксации иона Yb^{3+} от двухфононных процессов (17), (18). Как видно при низких температурах скорость релаксации определяется только акустическими фононами. Однако, с повышением температуры роль оптических колебаний решётки резко возрастает и начинает преобладать над акустическими выше 40 К, причём в более высокой области температур вклад акустических фононов пренебрежимо мал по сравнению с оптическими (при $T = 120$ К $\Gamma_2^{ac} \approx 10^8 \text{ c}^{-1}$, а $\Gamma_2^{om} \approx 10^{10} \text{ c}^{-1}$). Модель же Дебая, как оказалось, даёт заниженную оценку скорости релаксации не только по сравнению с суммарным вкладом от акустических и оптических колебаний решётки, но и даже по сравнению только с акустическим вкладом во всём интервале температур. Это интересно, потому что, казалось бы, рассмотренная модель учитывает, что в акустической моде при приближении к границе зоны Бриллюэна амплитуды колебаний лёгких атомов уменьшаются, а в модели Дебая все атомы, и лёгкие, и тяжёлые, при любом волновом векторе колеблются с одинаковой амплитудой.

Однако модель Дебая в силу использования линейного закона дисперсии не учитывает возрастание плотности состояний с приближением к границе зоны Бриллюэна, а в рассмотренной модели это обстоятельство выходит на передний план. Сильное возрастание плотности состояний компенсирует уменьшение амплитуды колебаний лёгких атомов и приводит к преобладанию акустического двухфононного вклада в релаксацию по сравнению с таковым, рассчитанным в модели Дебая.

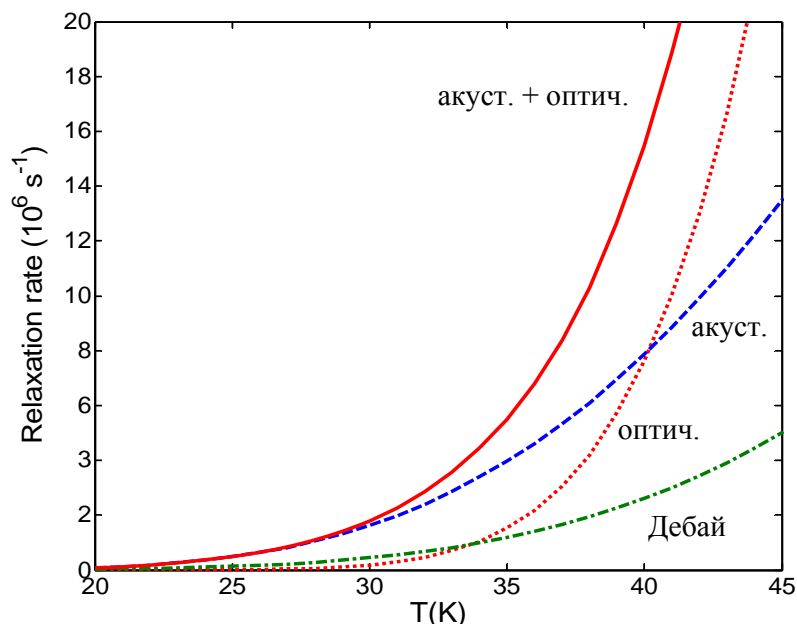


Рис. 5 Сравнение скорости релаксации иона Yb^{3+} в модельном кристалле со структурой NaCl , обусловленной двухфононными процессами с участием акустических фононов (штриховая линия), оптических фононов (пунктирная) и их суммы (сплошная линия) с рассчитанной в модели Дебая (штрихпунктирная линия).

На рис. 7 (стр. 19) приведена температурная зависимость ширины линии ЭПР наблюдаемого на ионе иттербия Yb^{3+} в YBCO . Спектр ЭПР соответствует спиновому гамильтониану (2) с $|g_{\parallel}| = 3.13$, $|g_{\perp}| = 3.49$ для $\text{YBCO}_{6.4}$ [4]. Величины g -факторов отвечают нижнему дублету ${}^1\Gamma_7'$ (см. рис. 1). Сильная нелинейная зависимость ширины линии ЭПР позволяет сделать вывод о преобладающей роли фононов в релаксации иона Yb^{3+} , нежели носителей тока. За нелинейную температурную зависимость спин-решёточной релаксации отвечают двухфононные процессы. Таковыми могут быть прямые процессы Орбаха-Аминова [7, 8], при которых ион иттербия совершает переход между подуровнями основного крамерсова дублета посредством перехода в возбуждённое состояние с поглощением фонона соответствующей частоты и последующим спонтанным или вынужденным переходом на основной дублет с излучением фонона. Температурная зависимость скорости релаксации обусловленная такими процессами имеет вид

$$\Gamma_2 = C \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right). \quad (20)$$

Эта формула может быть очень хорошо подогнана под экспериментальные данные на рис. 7, при этом для Δ получаются значения около 500 К. Но первый возбуждённый уровень в YBCO составляет величину около 1000 К [24]. Значит, такие процессы должны быть исключены из рассмотрения.

Вторым возможным механизмом релаксации являются рамановские двухфононные процессы [7, 8], рассмотренные в двух последних главах диссертации, при которых переход между зеемановскими подуровнями основного крамерсова дублета сопровождается виртуальным поглощением фонона с частотой ω_1 и испусканием фонона с частотой ω_2 с условием $\omega_2 - \omega_1 = \pm \omega_0$, которое обуславливает эффективность этих процессов, поскольку задействованы могут быть фононы из любой части спектра. При использовании дебаевского фононного спектра для скорости релаксации, обусловленной этими процессами, из (17), (18) следует известная температурная зависимость вида

$$\Gamma_2 = CT^9 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^8 e^x}{(e^x - 1)^2}, \quad (21)$$

Если в этом выражении рассматривать C и температуру Дебая Θ_D в качестве подгоночных параметров, то также удаётся подогнать его под экспериментальные данные (рис. 6). При этом для температуры Дебая получается значение $\Theta_D = 650$ К. Однако, эта величина слишком большая по сравнению с температурой Дебая, измеренной в экспериментах по теплоёмкости $\Theta_D \approx 300$ К [25]. Если же зафиксировать значение $\Theta_D = 300$ К, то описать эксперимент не удаётся (рис. 6).

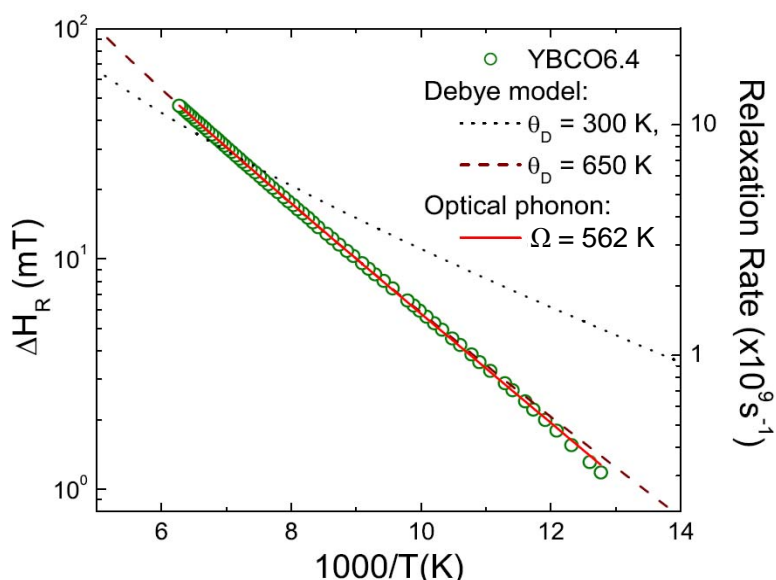


Рис. 6 Температурная зависимость ширины линии ЭПР в $Y_{0.98}Yb_{0.02}Ba_2Cu_3O_{6.4}$. Сплошная линия – подгонка по формуле (22), штриховая – по формуле (21) (извлечённая из подгонки температура Дебая $\Theta_D = 650$ К), пунктирная – по формуле (21) с фиксированной $\Theta_D = 300$ К.

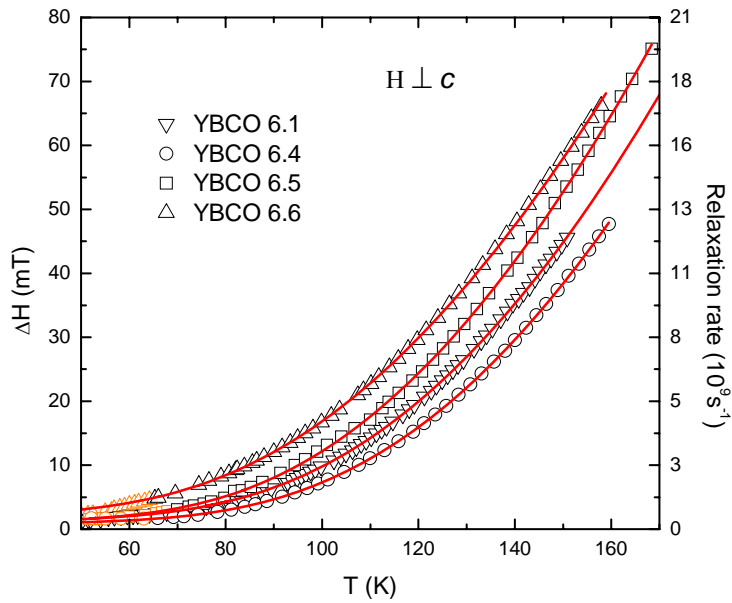


Рис. 7 Температурная зависимость ширины линии ЭПР в $Y_{0.98}Yb_{0.02}Ba_2Cu_3O_x$. Сплошные линии – подгонка по формуле (22), параметры подгонки приведены в таб. 5.

Таб. 5 Параметры подгонки экспериментальных данных на рис. 7 для $Y_{0.98}Yb_{0.02}Ba_2Cu_3O_x$ по формуле (22).

x	C (мТл)	Ω (К)	b (мТл/ К)
6.1	1214	521	0
6.4	1420	562	0.021
6.5	1068	477	0.03
6.6	710	419	0.058

Подгоночную формула для экспериментальны данных, учитывающую явно наличие оптического спектра колебаний решётки, можно получить из выражений (17), (18). В них температурная зависимость содержится в множителе $n(n+1)$, где n – функция Бозе-Эйнштейна. Считая оптическую полосу частот узкой, можно вынести этот множитель из-под знака интеграла, тогда получим выражение вида

$$\Gamma_2 = C \frac{\exp(\Omega/T)}{[\exp(\Omega/T) - 1]^2} + bT, \quad (22)$$

где Ω – энергия оптических фононов, и добавлен линейный член. Кривые на рис. 7 подогнаны под экспериментальные данные по этой формуле, параметры подгонки собраны в таб. 5 (линейный по температуре член, следует связать с релаксацией Корринги, поскольку однофононными процессами, дающими подобный же член, при высоких температурах можно пренебречь; параметр b для диэлектрика YBCO6.1 был положен равным нулю). Согласие с

экспериментом прекрасное. Извлекаемые из подгонки частоты оптических фононов (таб. 5) имеются в YBCO и связаны как раз с колебаниями плоскости CuO_2 ($\Omega = 470 - 560$ К [26, 27]). Первое слагаемое в (22) при значениях Ω из таб. 5 и температурах эксперимента $T = 60 - 160$ К переходит в выражение (20), что объясняет успех последнего при первоначальной обработке экспериментальных данных.

Основные результаты работы

1. Найдено аналитическое решение задачи на собственные функции, энергетический спектр и g -факторы иона Yb^{3+} в тетрагональном кристаллическом электрическом поле.
2. Выведены формулы, позволяющие получить все возможные наборы параметров тетрагонального КЭП для заданной энергетической схемы расщепления нижнего мультиплета $^2F_{7/2}$ иона Yb^{3+} .
3. Построена диаграмма g -факторов, которая по измеряемым в спектрах ЭПР g_{\parallel} , g_{\perp} -факторам позволяет наглядно судить, о том, какой из крамеровских дублетов иона Yb^{3+} является нижним.
4. Вычислена статическая магнитная восприимчивость соединений YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 на основе модели локализованных $4f$ -электронов. Показано, что полученная температурная зависимость магнитной восприимчивости Кюри-Вейсса и Ван Флека хорошо согласуется с экспериментальными данными.
5. Выведен эффективный гамильтониан спин-фононного взаимодействия для нижнего крамерсова дублета редкоземельного иона с нечетным числом f -электронов.
6. Методом функций Грина получены формулы для вкладов спин-фононного взаимодействия редкоземельных ионов с нечетным числом f - электронов в ширину линии ЭПР.
7. Предложена модель колебаний трехмерной двухатомной решетки, позволившая выйти за пределы приближения Дебая при расчёте спин-решёточной релаксации.
8. Показано, что вклад в ширину линии ЭПР оптических ветвей решеточных колебаний играет решающую роль в широком диапазоне температур. Выяснено, что основной вклад двухфононных рамановских процессов как оптических так и акустических ветвей определяется областью пространства волновых векторов вблизи границ зоны Бриллюэна.
9. Проведён анализ экспериментов, показавший, что температурная зависимость ширины линии ЭПР иона Yb^{3+} в слабо допированных купратах YBCO определяется вкладом оптических ветвей решёточных колебаний, соответствующих изгибным модам колебаний плоскости CuO_2

Список работ автора по теме диссертации

1. **Kutuzov, A.S.** Magnetic susceptibility of YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 on the basis of a localized $4f$ electron approach / A.S. Kutuzov, A.M. Skvortsova, S.I. Belov, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, I. Eremin, C. Krellner, C. Geibel, B.I. Kochelaev // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2008. – Vol. 20. – P. 455208-1–6.
2. Kochelaev, B.I. Why could electron spin resonance be observed in a heavy fermion Kondo lattice? / B.I. Kochelaev, S.I. Belov, A.M. Skvortsova, **A.S. Kutuzov**, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, C. Geibel, F. Steglich // *Eur. Phys. J. B.* – 2009. – DOI: 10.1140/epjb/e2009-00386-9
3. **Kutuzov, A.S.** Determination of tetragonal crystalline electric field parameters for Yb^{3+} and Ce^{3+} ions from experimental g -factors values and energy levels of Kramers doublets / A.S. Kutuzov, A.M. Skvortsova // *Magn. reson. solids* – 2009. – Vol. 11. – P. 7–13.
4. **Кутузов, А.С.** Статическая магнитная восприимчивость YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 / А.С. Кутузов, А.М. Скворцова, С.И. Белов, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, И.М. Ерёмин, С. Krellner, C. Geibel, Б.И. Кочелаев // VIII Научная конференция молодых ученых, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета “Материалы и технологии XXI века”: Тез. докл. – 28-29 октября 2008. – г. Казань. – С. 50.
5. Sichelschmidt, J. Electron spin resonance in Kondo lattice compounds / J. Sichelschmidt, B.I. Kochelaev, D. Zakharov, I. Fazlishanov, J. Wykhoff, A. Skvortsova, S. Belov, **A. Kutuzov**, H.A. Krug von Nidda, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich // International conference on strongly correlated electron Systems: Abstracts – 17–22 August 2008. – Buzios/Rio, Brazil.
6. Sichelschmidt, J. Low temperature properties of the EPR in YbRh_2Si_2 / J. Sichelschmidt, T. Kambe, I. Fazlishanov, D. Zakharov, H.A. Krug von Nidda, J. Wykhoff, A. Skvortsova, S. Belov, **A. Kutuzov**, B.I. Kochelaev, C. Krellner and C. Geibel. // International conference on quantum criticality and novel phases: Book of Abstracts. – 2-5 August 2009. – Dresden, Germany. – P. 184.

Цитируемая литература

- 1 **Sichelschmidt, J.** Low temperature electron spin resonance of the Kondo ion in a heavy fermion metal: YbRh_2Si_2 / J. Sichelschmidt, V.A. Ivanshin, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol. 91. – P. 156401-1–4.
- 2 **Sichelschmidt, J.** Spin dynamics of YbRh_2Si_2 observed by electron spin resonance / J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H-A. Krug von Nidda, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2007. – Vol. 19. – P. 116204-1–6.
- 3 **Kochelaev B.I.** Nanoscale properties of superconducting cuprates probed by the electron paramagnetic resonance / B.I. Kochelaev, G.B. Teitel’baum //

- Superconductivity in complex systems (structure and bonding). – Verlag, Berlin, Heidelberg: Springer. – 2005. – Vol. 114. – P. 205–266.
- 4 **Maisuradze, A.** Probing the Yb^{3+} spin relaxation in $\text{Y}_{0.98}\text{Yb}_{0.02}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ by electron paramagnetic resonance / A. Maisuradze, A. Shengelaya, B.I. Kochelaev, E. Pomjakushina, K. Conder, H. Keller, K.A. Müller // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79. – P. 054519-1–8.
 - 5 **Si, Q.** Locally critical quantum phase transitions in strongly correlated metals / Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, J.L. Smith // *Nature.* – 2001. – Vol. 413. – P. 804–808.
 - 6 **Kochelaev, B.I.** Why could electron spin resonance be observed in a heavy fermion Kondo lattice? / B.I. Kochelaev, S.I. Belov, A.M. Skvortsova, **A.S. Kutuzov**, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, C. Geibel, F. Steglich // *Eur. Phys. J. B.* – 2009. – DOI: 10.1140/epjb/e2009-00386-9
 - 7 **Абрагам, А.** Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. в 2 т. / А. Абрагам, Б. Блини. – М.: Мир. – Т. 1. – 1972. – 652 с. – Т. 2. – 1973. – 351 с.
 - 8 **Альтшулер, С.А.** Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп / С.А. Альтшулер, Б.М. Козырев. – М.: Наука. – 1972. – 672 с.
 - 9 **Sichelschmidt, J.** Electron spin resonance of YbIr_2Si_2 below the Kondo temperature / J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H.-A. Krug von Nidda, I.I. Fazlishanov, Z. Hossain, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2007. – Vol. 19. – P. 016211-1–6.
 - 10 **Reynolds, R.W.** EPR investigations of Er^{3+} , Yb^{3+} , and Gd^{3+} in zircon-structure silicates / R.W. Reynolds, L.A. Boatner // *J. Chem. Phys.* – 1972. – Vol. 56. – P. 5607–5625.
 - 11 **Yamaga, M.** An electron paramagnetic resonance study on Sm^{3+} and Yb^{3+} in KY_3F_{10} crystals / M. Yamaga, M. Honda, J-P. R. Wells, T.P.J. Han, H.G. Gallagher // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2000. – Vol. 12 – P. 8727–8736.
 - 12 **Falin, M.L.** EPR, ENDOR, and optical spectroscopy of the tetragonal Yb^{3+} center in KMgF_3 / M.L. Falin, V.A. Latypov, B.N. Kazakov, A.M. Leushin, H. Bill, D. Lovy // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol. 61. – P. 9441–9448.
 - 13 **Kirton, J.** Correlation of electron paramagnetic resonance and optical-absorption spectra of $\text{CaF}_2:\text{Yb}^{3+}$ / J. Kirton, S.D. McLaughlan // *Phys. Rev.* – 1967. – Vol. 155. – P. 279–284.
 - 14 **Леушин, А.М.** Кристаллическое поле тетрагональных центров иона Yb^{3+} в интерметаллиде YbRh_2Si_2 / А.М. Леушин, В.А. Иваньшин, И.Н. Куркин // *ФТТ.* – 2007. – Т. 49. – Вып. 8. – С. 1352–1355.
 - 15 **Leushin, A.M.** Crystalline electric fields and the ground state of YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 / A.M. Leushin, V.A. Ivanshin // *Physica B.* – 2008. – Vol. 403. – P. 1265–1267.
 - 16 **Gegenwart, P.** Quantum criticality in heavy-fermion metals / P. Gegenwart, Q. Si, F. Steglich // *Nat. Phys.* – 2008. – Vol. 4. – P. 186–197.
 - 17 **Schröder, A.** Onset of antiferromagnetism in heavy-fermion metals / A. Schröder, G. Aeppli, R. Coldea, M. Adams, O. Stockert, H.v. Löhneysen,

- E. Bucher, R. Ramazashvili, P. Coleman // *Nature*. – 2000. – Vol. 407. – P. 351–355.
- 18 **Gegenwart, P.** Magnetic properties close to the quantum critical point in YbRh_2Si_2 / P. Gegenwart, Y. Tokiwa, J. Custers, C. Geibel, F. Steglich // *J. Phys. Soc. Japan*. – 2006. – Vol. 75 (Suppl.). – P. 155–159.
 - 19 **Stockert, O.** Crystalline electric field excitations of the non-Fermi-liquid YbRh_2Si_2 / O. Stockert, M.M. Koza, J. Ferstl, A.P. Murani, C. Geibel, F. Steglich // *Physica B* – 2006. – Vol. 378-380. – P. 157–158.
 - 20 **Hiess, A.** Magnetisation dynamics of YbIr_2Si_2 / A. Hiess, O. Stockert, M.M. Koza, Z. Hossain, C. Geibel // *Physica B*. – 2006. – Vol. 378-380. – P. 748–749.
 - 21 **Barnes, S.E.** Theory of electron spin resonance of magnetic ions in metals / S.E. Barnes // *Adv. Phys.* – 1981. – Vol. 30. – P. 801–938.
 - 22 **Кочелаев, Б.И.** Режим электронного узкого горла для парамагнитных примесей в металлах в случае анизотропного обменного взаимодействия / Б.И. Кочелаев, А.М. Сафина // *ФТТ*. – 2004. – Т. 46. – С. 224–237.
 - 23 **Матисс, Д.** Теория магнетизма / Д. Матисс. – М.: Мир. – 1967. – 407 с.
 - 24 **Guillaume, M.** Neutron spectroscopy of the crystalline electric field in high- T_c $\text{YbBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ / M. Guillaume, P. Allenspach, J. Mesot, U. Staub, A. Furrer, R. Osborn, A.D. Taylor, F. Stucki, P. Unterh nner // *Solid State Commun.* – 1992. – Vol. 81. – P. 999–1002.
 - 25 **Molnar, S** Low-temperature specific heat of single-crystal $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ / S. von Molnar, A. Torressen, D. Kaiser, F. Holtzberg, T. Penney // *Phys. Rev. B*. – 1998. – Vol. 37. – P. 3762-3765.
 - 26 **Pintschovius, L.** Pronounced in-plane anisotropy of phonon anomalies in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ / L. Pintschovius, W. Reichardt, M. Kl aser, T. Wolf, H.v. L hneysen // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 89. – P. 037001-1–4.
 - 27 **Opel, M.** Physical origin of the buckling in CuO_2 : Electron-phonon coupling and Raman spectra / M. Opel, R. Hackl, T.P. Devereaux, A. Virosztek, A. Zawadowski, A. Erb, E. Walker, H. Berger, L. Forr  // *Phys. Rev. B*. – 1999. – Vol. 60. – P. 9836-9844.