Кросс-релаксация и эффект узкого фононного горла в магнитной динамике кристалла LiYF<sub>4</sub>:Ho<sup>3+</sup>.

М.В. Ванюнин, Б.З. Малкин,

Казанский государственный университет

#### План доклада

- Цель исследования
- Энергетический спектр иона Но<sup>3+</sup> в кристалле LiYF<sub>4</sub>
- Динамическая магнитная восприимчивость
  - Спин-решеточная релаксация и эффект фононного узкого горла
  - Кросс-релаксация
  - Сравнение теории с экспериментом
- Ядерная релаксация
- Заключение



Ac magnetic susceptibility in LiYF<sub>4</sub>:Ho<sup>3+</sup> (R.Giraud, A.M.Tkachuk, B.Barbara, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 257204)

# Энергетический спектр иона Но<sup>3+</sup> в кристалле LiYF<sub>4</sub>

- Основное состояние <sup>5</sup>I<sub>8</sub> электронной конфигурации 4f<sup>10</sup> в кристаллическом поле симметрии S<sub>4</sub> дает низколежащий некрамерсов дублет Г<sub>34</sub> и первый возбужденный синглет Г<sub>2</sub>
- Основной дублет характеризуется большим gфактором вдоль тетрагональной оси симметрии.

• 
$$H = H_{CF} + g_{J} m_{B} B J + A J I$$
,  
 $(I = 7/2 - ядерный спин$   
Ho<sup>3+</sup>)  
21 К  
 $\Gamma_{2}$   
10 К  
 $\Gamma_{34}$   
 $g = 13,3$ 

### Сверхтонкая структура основного дублета Но<sup>3+</sup> в LiYF<sub>4</sub>



### Динамическая магнитная восприимчивость

 $\chi(\omega) = \chi_{VV} + \chi_{REL}(\omega)$ 

 $X_{VV} = \sum_{n,m} \frac{\rho_n - \rho_m}{E_m - E_n} |M_{nm}|^2$ 

$$\chi_{REL}(\omega) = Tr M \chi_{diag}(\omega)$$

Восприимчивость, обусловленная смешиванием волновых функций

Вклад релаксационных механизмов

$$\chi_{\text{diag}}(\omega) = \chi_{\text{diag}}^{SL}(\omega) + \chi_{\text{diag}}^{CR}(\omega)$$

Восприимчивость диагональных компонент матрицы плотности. Рассматриваются спинрешеточный и кросс-релаксационный механизмы.

### Восприимчивость диагональных компонент матрицы плотности

$$\dot{\rho_n} = \sum_m W_{nm} \rho_m$$

$$-i\omega\Delta\rho_{n} = \sum_{m} \left[ \Delta W_{nm}\rho_{m} + W_{nm}\Delta\rho_{m} \right]$$

$$\mathbf{0} = \sum_{m} \left\{ \Delta W_{nm} \rho_{m} + W_{nm} \Delta \rho_{m}(\mathbf{0}) \right\}$$

$$-i\omega\Delta\rho_n(\omega) = \sum_m W_{nm} \left[ \Delta\rho_m(\omega) - \Delta\rho_m(\mathbf{0}) \right]$$

$$-i\omega \chi_{diag}(\omega) = W[\chi_{diag}(\omega) - \chi_{diag}(\mathbf{0})]$$

Уравнение получено в приближении низких частот

#### Спин-решеточная релаксация

$$\dot{\rho}_{n} = \sum_{m} W_{nm}^{SL} \rho_{m} = \sum_{m} W_{nm} \left\{ n_{nm} + \Theta(\omega_{mn}) \right\} \rho_{m}$$
$$\dot{n}_{tb} = \frac{n_{tb}^{0} - n_{tb}}{\tau_{ph}} + \frac{W_{tb}}{\Omega_{tb}} \left( \left\{ n_{tb} + \mathbf{1} \right\} \rho_{t} - n_{tb} \rho_{b} \right)$$

 $\Omega_{tb} = P_{tb} \Delta \omega_{tb} / N$ 

число фононных осцилляторов приходящихся на один ион Но<sup>3+</sup>

 $P_{tb} = 3\omega_{tb}^2/2\pi^2 v^3$ 

плотность фононных осцилляторов на частоте  $\omega_{th}$ 

N – концентрация ионов Но<sup>3+</sup>,  $\Delta \omega_{t\,b}$  – ширина линии, v – скорость звука

$$W_{nm}^{SL(R)} = W_{nm}^{SL} \left[1 + \frac{W_{nm} |\rho_n - \rho_m|}{\Omega_{nm} (1/\tau_{ph} - i\omega)}\right]^{-1}$$

Кросс-релаксация  

$$\dot{\rho}_{n} = \sum_{m} W_{nm}^{SL} \rho_{m} + CR_{n} \qquad p \qquad l \\
CR_{n} = \sum_{m, p, l} (W_{np, lm}^{CR} \rho_{p} \rho_{m} - W_{pn, ml}^{CR} \rho_{l} \rho_{n}) \qquad l \qquad l \\
W_{np, lm}^{CR} = \frac{2\pi}{\hbar^{2}} \langle |\langle n, l|H_{12}|p, m\rangle|^{2} \rangle_{Av} \delta(\omega_{pn} - \omega_{lm}) \qquad n \qquad m$$

m

$$W_{np,Im}^{CR} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} k_{\alpha\beta\gamma\delta} g_{\alpha\beta\gamma\delta}^{CR} (\omega_{pn} - \omega_{Im}) \times \{\langle n|J_{1\alpha}|p\rangle \langle I|J_{1\beta}|m\rangle \langle p|J_{1\alpha}|n\rangle \langle m|J_{1\beta}|I\rangle + c.c.\}$$

$$\Delta \dot{\rho_n} = \sum_m (W_{nm}^{SL} + W_{nm}^{CR}) \Delta \rho_n$$
 в постоянном поле вблизи равновесия

 $\boldsymbol{W}_{nm}^{CR} = \sum_{l, p} \left( \boldsymbol{W}_{np, lm}^{CR} \rho_p + \boldsymbol{W}_{nm, lp}^{CR} \rho_p - \boldsymbol{W}_{pn, lm}^{CR} \rho_n \right)$ 

### Пример расчета (0,27% 800 Гц 2 К)



## Сравнение теории с экспериментом (1,75 К 800 Гц)



Измеренная скорость спин-решеточной релаксации намагниченности ядер <sup>19</sup>F (символы) сравнивается с результатами расчетов (линии) с учетом (1) и без учета (3) прямого обмена энергией ядер фтора с ионами гольмия (кривая 3 смещена вниз для наглядности), пунктирная кривая 2 получена в пренебрежении случайным кристаллическим полем.



### Заключение

- Разработана микроскопическая теория динамической магнитной восприимчивости электронно-ядерной подсистемы разбавленного парамагнетика LiYF<sub>4</sub>:Ho<sup>3+</sup>.
- Рассчитанные полевые, температурные и частотные зависимости магнитной восприимчивости кристаллов LiYF<sub>4</sub>:Ho<sup>3+</sup> при различных концентрациях ионов Ho<sup>3+</sup> хорошо согласуются с данными измерений
- Показана важная роль эффекта узкого фононного горла при гелиевых температурах.
- Определены параметры взаимодействия между парамагнитными ионами, определяющие скорости кроссрелаксации.
- Объяснены особенности релаксации намагниченности ядер фторов.