

# СПЕКТР ЯМР В НЕКОЛЛИНЕАРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$

*O. Г. Удалов\**

*Институт физики микроструктур Российской академии наук  
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 1 марта 2011 г.

В рамках обменного приближения для спиновой динамики выполнен расчет зависимости резонансных частот ЯМР от внешнего магнитного поля в неколлинеарном 12-подрешеточном антиферромагнетике  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$ .

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Спектр ЯМР кристалла неколлинеарного антиферромагнетика  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$  определяется взаимодействием ядерных магнитных моментов с внешним полем и магнитными моментами электронной подсистемы. Спектр последней был исследован теоретически и экспериментально в работе [1]. В случае направления магнитного поля вдоль оси третьего порядка зависимость резонансных частот от величины внешнего магнитного поля имеет три ветви, которые расположены в высокочастотной области (десятки ГГц). В случае, когда поле направлено вдоль оси четвертого порядка, зависимость также имеет 3 ветви, но одна из ветвей (согласно теоретическим предсказаниям [1]) при определенном поле «спускается» в низкочастотную область спектра, где расположены резонансы ЯМР. Спектр колебаний магнитных моментов ядерной подсистемы в кристалле  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$  исследовался в работе [2]. В области  $H_{cr} = 2.5 \pm 0.3$  Тл наблюдается пик поглощения, что согласуется с результатами, полученными в работе [1].

Теоретический подход к описанию колебаний электронных магнитных моментов, использованный в работе [1], опирается на теорию обменной симметрии [3]. Она существенно упрощает описание системы, в которой обменное взаимодействие доминирует (в частности, для описания  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$  вместо 12 векторов подрешеток требуется всего 2 вектора). В рамках обменного приближения все магнитные моменты электронной подсистемы (обозначим их через

$\mathbf{M}_i$ ) имеют одинаковую величину, что приводит к вырождению спектра ЯМР. При учете релятивистских поправок к обменной структуре векторы  $\mathbf{M}_i$  изменяются. Это приводит к незначительным количественным поправкам в спектре колебаний магнитных моментов электронной системы. Спектр ядерных спинов при этом может измениться качественным образом (снятие вырождения, см., например, работу [4]).

Существенный вклад в формирование спектра ЯМР должно давать то обстоятельство, что электронные магнитные моменты на различных узлах обменно взаимодействуют друг с другом, обеспечивая тем самым косвенное взаимодействие ядерных спинов.

Исследование влияния релятивистских искажений обменной спиновой структуры, внешнего магнитного поля и косвенного взаимодействия ядерных спинов на формирование спектра ЯМР в  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$  составляет цель данной работы.

## 2. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ К ОБМЕННОЙ СПИНОВОЙ СТРУКТУРЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

Антиферромагнетик  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$  имеет группу симметрии  $O_{10}^h$  [1]. Пространственное распределение магнитного момента электронной подсистемы будем описывать с помощью шести неприводимых представлений группы перестановок подрешеток, осуществляемых преобразованиями группы симметрии кристалла: два одномерных,  $A_u$ ,  $A_g$ , два двумерных,  $E_u$ ,  $E_g$  и два трехмерных,  $F_u$ ,  $F_g$ . Пусть

\*E-mail: udalovoleg@mail.ru, udalov@ipm.sci-nnov.ru

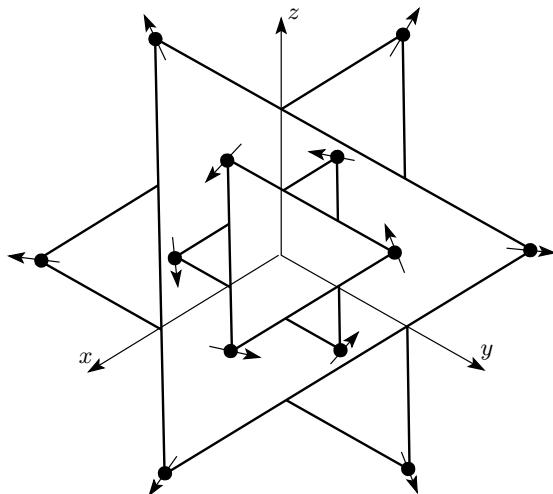


Рис. 1. Ориентация магнитных моментов в  $\text{Mn}_3\text{Al}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$

$\mathbf{a}_{g,u}$  — векторы четного и нечетного одномерных представлений,  $\mathbf{b}_{1,2}$  и  $\mathbf{b}_{3,4}$  — векторы четного и нечетного двумерных представлений  $\mathbf{d}_{1,2,3}$  и  $\mathbf{d}_{4,5,6}$  — векторы трехмерных представлений. Первая тройка — четное представление, вторая — нечетное.

В обменном приближении в  $\text{Mn}_3\text{Al}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  отличны от нуля векторы  $\mathbf{b}_{3,4}$  двумерного представления  $E_u$ . Эти векторы преобразуются при перестановках, соответствующих поворотам  $C_3$  и  $C_4$  следующим образом [1]:

$$C_4\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_3, \quad C_4\mathbf{b}_4 = -\mathbf{b}_4,$$

$$C_3\mathbf{b}_3 = -\frac{1}{2}\mathbf{b}_3 - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{b}_4, \quad C_3\mathbf{b}_4 = -\frac{1}{2}\mathbf{b}_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{b}_3.$$

Обменная энергия (инвариантная относительно этих преобразований) имеет вид

$$E_B^{ex} = E_B^{ex}((\mathbf{b}_3^2 + \mathbf{b}_4^2), (\mathbf{b}_3 \cdot \mathbf{b}_4)^2 - \mathbf{b}_3^2 \mathbf{b}_4^2). \quad (1)$$

Минимум  $E_B^{ex}$  достигается, когда  $\mathbf{b}_3$  и  $\mathbf{b}_4$  имеют одинаковую величину и ортогональны друг другу. Обозначим векторы, соответствующие минимуму обменной энергии, через  $\mathbf{l}_1$  и  $\mathbf{l}_2$  ( $|\mathbf{l}_1| = |\mathbf{l}_2| = 1$ ). Магнитные моменты электронов на узлах  $\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_{12}$  при этом будут иметь одинаковую длину и расположены в спиновой плоскости, как показано на рис. 1.

Ориентация спиновой плоскости в основном состоянии в отсутствие внешнего магнитного поля задается анизотропией, имеющей релятивистскую природу. Энергия анизотропии имеет вид [1]

$$U_B^{an} = \lambda_{an} \left( l_{2z}^2 - l_{1z}^2 + \frac{2}{\sqrt{3}}(l_{1x}l_{2x} - l_{1y}l_{2y}) \right). \quad (2)$$

При положительном знаке  $\lambda_{an}$  в отсутствие внешнего магнитного поля спиновая плоскость будет перпендикулярна одному из четырех направлений (вдоль одной из осей  $C_3$ ).

Если к системе приложено внешнее поле вдоль оси  $C_3$ , то наиболее энергетически выгодным станет положение спиновой плоскости перпендикулярное магнитному полю [1]. Если через  $\tilde{\theta}$ ,  $\tilde{\varphi}$ ,  $\tilde{\psi}$  обозначить эйлеровы углы, определяющие ориентацию тройки  $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \mathbf{n} = [\mathbf{l}_1 \times \mathbf{l}_2]$ , то положение, отвечающее минимальной энергии, будет соответствовать углам  $\tilde{\theta}_0 = -\pi/4$ ,  $\tilde{\varphi}_0 = -\arccos(1/\sqrt{3})$ ,  $\tilde{\psi}_0 = \pi/2$ . Если же поле направлено вдоль оси  $C_4$  (например, ось  $(001)$ ), то спиновая плоскость будет находиться под углом к этой оси. Этот угол определяется выражением

$$\cos \tilde{\varphi}_0 = \frac{\lambda_{an}}{\sqrt{3} - (\chi_{||} - \chi_{\perp})\gamma^2 H^2}. \quad (3)$$

Здесь  $\chi_{||}$  и  $\chi_{\perp}$  — восприимчивости перпендикулярная и параллельная спиновой плоскости,  $\gamma$  — гиромагнитное отношение,  $H$  — внешнее магнитное поле. При этом  $\tilde{\theta}_0 = -\pi/4$ ,  $\tilde{\psi}_0 = \pi/2$ . В сильных полях, направленных вдоль  $(001)$  и превышающих критическое поле

$$H_{cr} = \gamma^{-1} \sqrt{(\sqrt{3} - 1)\lambda_{an}/(\chi_{||} - \chi_{\perp})},$$

спиновая плоскость ориентирована перпендикулярно  $(001)$ .

Анизотропия приводит к искажению спиновой структуры, в частности, к изменению длины векторов  $\mathbf{b}_{3,4}$  и угла между ними. Введем следующие обозначения:  $|\mathbf{b}_3| = \tilde{\eta} \cos \tilde{\xi}$ ,  $|\mathbf{b}_4| = \tilde{\eta} \sin \tilde{\xi}$ ,  $\tilde{\phi}$  — угол между векторами  $\mathbf{b}_3$  и  $\mathbf{b}_4$ . Минимуму обменной энергии  $E_B^{ex}$  соответствуют значения  $\tilde{\eta} = \eta_0$ ,  $\tilde{\xi} = \pi/4$ ,  $\tilde{\phi} = \pi/2$ . Разложение обменной энергии по малым отклонениям от равновесия имеет вид [3]

$$E_B^{ex} = E_0 + C_1(4\xi^2 + \phi^2) + C_2\eta^2. \quad (4)$$

Здесь  $\xi, \phi, \eta$  — поправки к значениям параметров  $\tilde{\eta}$ ,  $\tilde{\xi}$ ,  $\tilde{\phi}$ , полученным в обменном приближении,  $C_{1,2}$  — константы. В первом порядке малости по параметру  $\lambda_{an}/C_{1,2}$  нетрудно найти  $\xi, \phi, \eta$ , минимизируя сумму  $E_B^{ex} + E_B^{an}$ :

$$\eta = -\frac{\lambda_{an}}{C_2} \left( l_{2z}^2 - l_{1z}^2 + \frac{2}{\sqrt{3}}(l_{1x}l_{2x} - l_{1y}l_{2y}) \right),$$

$$\xi = -\frac{\lambda_{an}}{2C_1} \left( l_{2z}^2 + l_{1z}^2 - \frac{2}{3} \right), \quad (5)$$

$$\phi = -\frac{\lambda_{an}}{C_1} \frac{1}{\sqrt{3}}(l_{1y}^2 + l_{2y}^2 - l_{1x}^2 - l_{2x}^2).$$

В равновесном состоянии в случае, когда внешнее поле направлено вдоль оси  $C_3$ , имеем  $\eta = 4\lambda_{an}/3C_2$ ,  $\xi, \phi = 0$ . В случае, когда поле направлено вдоль оси  $C_4$ , получаем

$$\begin{aligned} \eta &= -\frac{\lambda_{an}}{C_2} \left( \cos^2 \tilde{\theta}_0 - \frac{2\sqrt{3}}{3} \cos \tilde{\theta}_0 - 1 \right), \\ \xi &= -\frac{\lambda_{an}}{2C_1} (\sin^2(\tilde{\theta}_0/2) - 1/3), \\ \phi &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Релятивистские эффекты также приводят к появлению отличного от нуля вектора единичного представления  $\mathbf{a}_u$  (т. е. явлению слабого антиферромагнетизма). Связь между представлениями  $A_u$  и  $E_u$  обеспечивается релятивистским вкладом в энергию вида

$$\begin{aligned} U_{B-A}^{an} &= \lambda_{A-B} ((-a_{ux}l_{1x} - a_{uy}l_{1y} + \\ &+ 2a_{uz}l_{1z})/\sqrt{3} - a_{ux}l_{2x} + a_{uy}l_{2y}). \end{aligned} \quad (7)$$

Обменная энергия для представления  $A_u$  может быть записана в следующей форме:

$$\begin{aligned} U_A^{ex} &= \alpha_1 ((\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{a}_u)^2 + (\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{a}_u)^2) + \alpha_2 \mathbf{a}_u^2 \\ &(\alpha_1 > 0, \quad \alpha_1 + \alpha_2 > 0). \end{aligned} \quad (8)$$

Минимизируя  $U_A^{ex} + U_{B-A}^{an}$ , можно выразить вектор  $\mathbf{a}_u$  через  $\mathbf{l}_{1,2}$ . Здесь, однако, мы не будем выписывать выражение для  $\mathbf{a}_u$  при произвольных положениях  $\mathbf{l}_{1,2}$ , так как они довольно громоздки. В случае, когда внешнее магнитное поле направлено вдоль оси  $C_3$ ,  $\mathbf{a}_u = 0$ , а когда вдоль оси  $C_4$ , имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_u &= \left( \frac{\lambda_{A-B}}{\sqrt{2}(\alpha_1 + \alpha_2)} (1 - \sqrt{3} \cos \tilde{\theta}), \right. \\ &\quad \left. \frac{\lambda_{A-B}}{\sqrt{2}(\alpha_1 + \alpha_2)} (1 - \sqrt{3} \cos \tilde{\theta}), 0 \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Внешнее магнитное поле не только определяет ориентацию плоскости, в которой лежат векторы  $\mathbf{l}_1$  и  $\mathbf{l}_2$ , но также приводит к возникновению среднего магнитного момента у системы, т. е. к возникновению ненулевого вектора  $\mathbf{a}_g = \chi \mathbf{H}$ , где  $\chi$  — тензор магнитной восприимчивости.

С учетом релятивистских поправок магнитные моменты  $\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_{12}$  принимают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + 2 \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 + \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - 2 \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 + \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_7 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + 2 \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_8 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_9 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 - \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 + \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_{11} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{b}_3 + \frac{1}{2} \mathbf{b}_4, \\ \mathbf{M}_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_g + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a}_u - 2 \mathbf{b}_4. \end{aligned} \quad (10)$$

При этом

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_3 &= \mathbf{l}_1 (1 + \eta - \xi) - \frac{\mathbf{l}_2 \phi}{2}, \\ \mathbf{b}_4 &= \mathbf{l}_2 (1 + \eta + \xi) - \frac{\mathbf{l}_1 \phi}{2}. \end{aligned} \quad (11)$$

### 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И ЯДЕРНОЙ ПОДСИСТЕМ

Магнитные моменты ядер не взаимодействуют друг с другом напрямую и поэтому могут быть описаны как 12 независимых подрешеток. Равновесное положение определяется их взаимодействием с электронными магнитными моментами  $-A(\mathbf{M}_n^i \cdot \mathbf{M}_i)$  и внешним магнитным полем  $-\gamma_n(\mathbf{M}_n^i \cdot \mathbf{H})$  (здесь  $\mathbf{M}_n^i$  — вектор магнитного момента  $i$ -го ядра,  $\gamma_n$  — ядерное гиromагнитное отношение,  $A$  — константа сверхтонкого взаимодействия). При этом  $\mathbf{M}_n^i = \chi_n(A\mathbf{M}_i + \mathbf{H})$ ,  $\chi_n$  — ядерная восприимчивость.

#### 4. ДИНАМИКА СИСТЕМЫ

Динамика электронной подсистемы определяется уравнением Лагранжа [3]

$$\frac{\delta L}{\delta \dot{\theta}} - \frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\theta}} = 0,$$

$$L = E_{kin} - U_B^{an} - U_{B-A}^{an} - U_A^{ex} - U_B^{ex} - W_{el-nuc}, \quad (12)$$

$$E_{kin} = \frac{\chi_\perp}{\gamma^2} (\Omega + \gamma \mathbf{H})^2 + \frac{\chi_\parallel}{\gamma^2} ((\Omega + \gamma \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n})^2,$$

$\Omega$  — угловая скорость спиновых вращений. Энергия взаимодействия ядерной и электронной подсистем описывается выражением

$$W_{el-nuc} = - \sum_{i=1}^{12} A (\mathbf{M}_n^i \cdot \mathbf{M}_i). \quad (13)$$

Динамика ядерной подсистемы описывается двенадцатью уравнениями Ландау — Лифшица для каждой из подрешеток:

$$\frac{\partial \mathbf{M}_n^i}{\partial t} = \gamma_n [\mathbf{M}_n^i \times (\mathbf{H} + A \mathbf{M}_i)], \quad i \in [1, 12]. \quad (14)$$

*Случай, когда поле направлено вдоль оси  $C_3$ .* При данном направлении поля основное состояние электронной системы является высокосимметричным. Нет искажений обменной структуры  $|\mathbf{l}_1| = |\mathbf{l}_2|$  и  $\mathbf{a}_u = 0$ . Это означает, что все магнитные моменты  $\mathbf{M}_i$  имеют одинаковую длину. При этом поле направлено перпендикулярно спиновой плоскости. Соответственно, в основном состоянии комбинация  $\mathbf{H} + A \mathbf{M}_i$  одинакова для всех  $i$ . Расщепление спектра, однако, возникает из-за взаимодействия различных подрешеток ядерных магнитных моментов друг с другом через электронную подсистему.

Как уже было сказано, резонансные линии электронной подсистемы в случае внешнего поля, направленного вдоль  $C_3$ , лежат в высокочастотной области спектра. Поэтому при расчете резонансных линий ядерной подсистемы динамика электронной не учитывалась. В этом случае резонансные частоты ядерной подсистемы могут быть представлены в виде простых выражений:

$$\omega_1^{nuc} = \gamma_n A m_e \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{1 + A \chi_\parallel / \sqrt{2}}{A m_e / \sqrt{2}} \right)^2 H^2 \right), \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \omega_2^{nuc} = \gamma_n A m_e & \left( 1 - \frac{9}{16} \frac{A^2 m_e^2 \chi_n}{\lambda_{an}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{1 + A \chi_\parallel / \sqrt{2}}{A m_e / \sqrt{2}} \right)^2 H^2 \right), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \omega_3^{nuc} = \gamma_n A m_e & \left( 1 + \frac{9}{16} \frac{A^2 m_e^2 \chi_n}{\lambda_{an}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{1 + A \chi_\parallel / \sqrt{2}}{A m_e / \sqrt{2}} \right)^2 H^2 \right). \end{aligned} \quad (17)$$

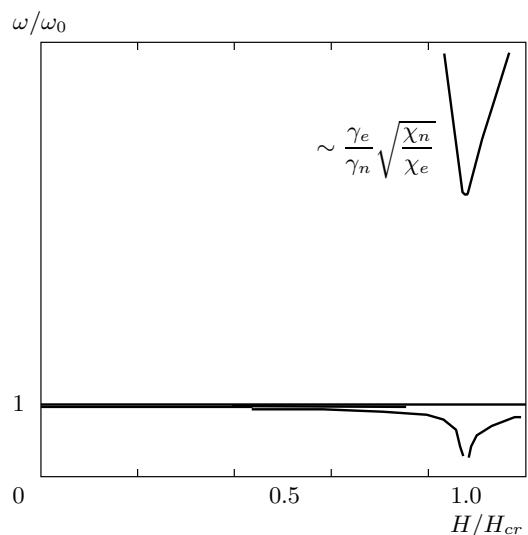
Здесь  $m_e$  — величина магнитного момента электронов на узле.

Величина расщепления определяется отношением энергии взаимодействия электронной и ядерной подсистем и характерной энергии электронной подсистемы  $A^2 m_e^2 \chi_n / \lambda_{an}$ .

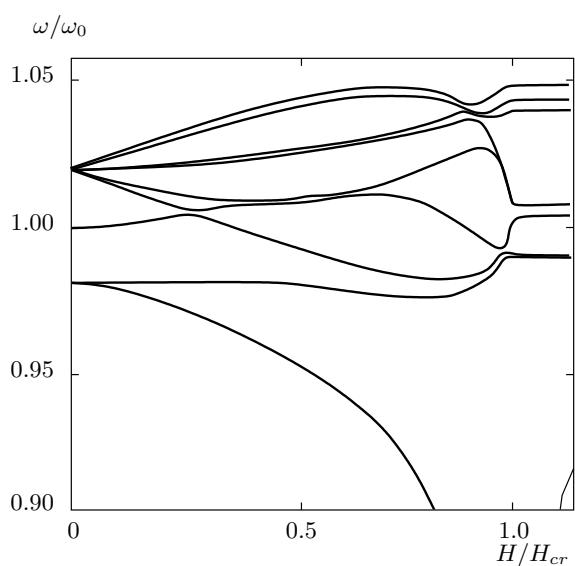
*Случай, когда поле направлено вдоль оси  $C_4$ .* Как уже было отмечено, в этом случае одна из веток зависимости резонансной частоты электронной подсистемы от внешнего поля «спускается» в область низких частот. Тогда пренебречь динамикой электронной подсистемы уже нельзя и необходимо совместно решать динамическое уравнение (12) и систему уравнений (14). Для упрощения системы уравнений при решении мы пренебрегли влиянием ядерной подсистемы на основное состояние электронной, так как эти поправки дадут вклад в спектр ядерных магнитных моментов порядка  $(A^2 m_e^2 \chi_n / \lambda_{an})^2$ . Аналитических выражений для зависимости резонансных частот от величины внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси  $C_4$ , получить не удается, поэтому далее мы приведем лишь графики таких зависимостей, полученные численными методами.

Без учета релятивистских искажений обменной структуры зависимость резонансных частот от внешнего поля имеет четыре ветви. Одна из веток ЯМР (вследствие «взаимодействия» с «падающей» электронной веткой) спускается к нулевой частоте, расщепление остальных веток определяется величиной  $A^2 m_e^2 \chi_n / \lambda_{an}$ . Зависимость резонансных частот ЯМР от внешнего поля без учета релятивистских поправок представлена на рис. 2. Параметры  $A$ ,  $m_e$  и  $\gamma_n$  выбраны таким образом, что отношение несмещенной частоты ЯМР  $\omega_0 = \gamma_n A m_e$  к наименьшей из резонансных частот колебаний электронных магнитных моментов в нулевом магнитном поле  $(\gamma/2\pi)\sqrt{2\lambda_{an}/\sqrt{3}\chi_\perp}$  составляет 0.05. Отношение энергии взаимодействия электронной и ядерной подсистем и характерной энергии электронной подсистемы  $A^2 m_e^2 \chi_n / \lambda_{an} = 0.036$ .

В поле  $H \approx H_{cr}$  одна из электронных веток спускается в низкочастотную область. Величину щели в спектре электронных колебаний грубо можно оценить по формуле  $\delta\omega_e = \zeta\omega_0\sqrt{\chi_n\gamma_e^2/\chi_e\gamma_n^2}$ , где  $\zeta$  — константа. Четыре ветви ЯМР расщепляются на девять



**Рис. 2.** Зависимость резонансных частот от внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси (001), без учета релятивистских поправок



**Рис. 3.** Зависимость резонансных частот от внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси (001), с учетом релятивистских поправок

при учете релятивистских поправок (рис. 3). Один из механизмов расщепления — это переориентация спиновой плоскости при изменении величины внешнего поля, которая приводит к изменению эффективного магнитного поля, действующего на ядерные спины. Данный механизм был «выключен» при ориентации поля вдоль оси (111) в силу симметрично-

сти положения магнитных моментов электронов относительно поля. Когда поле направлено вдоль оси (001), электронные магнитные моменты ориентированы относительно него по-разному и соответствующие эффективные поля  $\gamma_{nuc} |A\mathbf{M}_i^0 + \mathbf{H}|$  различны. Отношение  $|\mathbf{H}|/A|\mathbf{M}_i^0| \approx 10^{-2}$ . В полях выше критического, когда поворот спиновой плоскости закончен, влияние магнитного поля аналогично случаю поля, направленного вдоль (111). Искажение обменной структуры (изменение длины и взаимной ориентации векторов  $\mathbf{b}_{3,4}$ ) также влияет на резонансные частоты ядерной подсистемы, так как входит в  $\mathbf{M}_i$ . При расчетах параметры  $\lambda_{an}$  и  $C_{1,2}$  были выбраны таким образом, что  $\lambda_{an}/C_{1,2} \approx 10^{-2}$ , поэтому искажение обменной структуры так же, как и магнитное поле, дает поправки к частоте порядка  $10^{-2}$ . Поправки, связанные с существованием слабого антиферромагнетизма, также можно оценить как  $\lambda_{A-B}/\alpha_{1,2} \approx 10^{-2}$  (при выбранных нами параметрах). Наличие нескольких механизмов, дающих одинаковый по величине вклад, приводит к достаточно сложной зависимости резонансных частот от поля. Для описания спектра в данном случае требуется еще четыре дополнительные константы.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено теоретическое исследование ядерного магнитного резонанса кристалла неколлинеарного антиферромагнетика  $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$ . Особенности спектра формируются за счет влияния нескольких механизмов: косвенного взаимодействия ядерных спинов через электронную подсистему, переориентации магнитных моментов электронов во внешнем поле, релятивистских искажений обменной спиновой структуры электронной подсистемы, непосредственного влияния внешнего магнитного поля на ядерные спины. Спектр возбуждений исследован при двух ориентациях внешнего магнитного поля. Если поле направлено вдоль оси  $C_3$ , то зависимость резонансных частот от величины внешнего поля состоит из трех веток, возникновение которых обусловлено косвенным взаимодействием ядерных спинов. Искажение обменной спиновой структуры электронной подсистемы за счет релятивистских взаимодействий и переориентация электронной спиновой структуры под действием внешнего поля в данном случае не возникают из-за высокой симметрии системы. Для описания полевой зависимости резонансных частот в этом случае требуется одна дополнительная (к тем, что

описывают колебания электронной подсистемы) константа — константа сверхтонкого взаимодействия. Если внешнее поле направлено вдоль оси  $C_4$ , то зависимость резонансных частот от поля состоит из девяти веток. При данной ориентации поля существенными становятся искажения спиновой структуры, а именно, слабый антиферромагнетизм, анизотропная редукция спина и изменение угла между обменными векторами, а также переориентация магнитных моментов электронов во внешнем поле, для описания которых необходимо введение пяти дополнительных констант.

Автор выражает искреннюю благодарность В. И. Марченко за поддержку при выполнении

данной работы и полезное обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-90702-моб\_ст).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л. А. Прозорова, В. И. Марченко, Ю. В. Красняк, Письма в ЖЭТФ **41**, 522 (1985).
2. А. Ю. Семанин, Г. Д. Соколов, А. М. Тихонов, ПТЭ **1**, 100 (2011).
3. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, УФН **130**, 39 (1980).
4. В. И. Марченко, А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ **69**, 41 (1990).