Функционал (37) является выражением потенциальной энергии деформации, которое следует использовать при решении нелинейных задач о деформировании оболочек с низкой трансверсальной сдвиговой жесткостью.

Оно также необходимо для получения разрешающих уравнений устойчивости оболочек, в расчетных моделях которых учитывается трансверсальный сдвиг.

#### Библиографические ссылки

1. Новожилов В. В. Теория упругости. Л. : Суд-промгиз, 1958.

2. Васильев В. В. Механика конструкций из композиционных материалов. М. : Машиностроение, 1988.

V. A. Nesterov, A. V. Lopatin

## ENERGY DERIVATION OF DEFORMATION OF THE SHELL IN GEOMETRICAL NONLINEAR ARRANGEMENT

In geometrically nonlinear arrangement a variational problem of deformation of shell with low value of transverse shear stiffness is considered. The conclusion of expression of potential energy of deformation which can be used for generation of the equations of stability for shells with low value of transverse shear stiffness.

Keywords: a shell, transverse shear, variational problem.

© Нестеров В. А., Лопатин А. В., 2010

УДК 535.5; 538

# Е. А. Попов

## ВЛИЯНИЕ УПРУГОЙ ПОДСИСТЕМЫ МАГНИТНОГО ДИЭЛЕКТРИКА НА ЕГО ОПТИЧЕСКИЙ СПЕКТР

Обсуждаются результаты изменения тонкой структуры оптического спектра антиферромагнитного диэлектрика под действием одноосного давления. По расщеплению и смещению полос поглощения света определены состояния ионов, порождающие серии полос поглощения, оценено изменение компонент кристаллического поля на поглощающем свет ионе.

Ключевые слова: экситон, магнон, поглощение света, антиферромагнетик.

Спектры поглощения света кристаллов, содержащих 3d-, 4f- и другие ионы, формируются из спектров входящих в их состав ионов, изменённых действием кристаллического поля и взаимодействиями между ионами. Положение полос поглощения хорошо описывается в теории поля лигандов [1]. Интенсивность полос поглощения и тонкая структура спектров не объясняется в рамках этой теории и является следствием коллективных возбуждений различных подсистем кристалла (электронной, магнитной, упругой), хотя исходно и порождается прямыми электронными переходами в 3d-, 4f- и других ионах. В антиферромагнитных кристаллах, содержащих  $3d^5$ -ионы (Mn<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>), основное состояние которых <sup>6</sup>S, прямые электронные переходы запрещены по спину и по чётности в электродипольном приближении. Поэтому интенсивные линии в спектрах поглощения света таких кристаллов имеют сложную многочастичную природу. Связать полосы поглощения спектра с конкретными электронными переходами возможно лишь после анализа реакции полос спектра на внешние воздействия. В данной работе рассмотрено изменение спектра оптического поглощения антиферромагнитного кристалла Rb<sub>2</sub>MnCl<sub>4</sub>

при действии на него одноосного давления с целью выявления прямых источников серий полос поглощения в районе частот ~26 500 см<sup>-1</sup>, образованных с участием перехода  ${}^{6}A_{1g}({}^{6}S) \rightarrow {}^{4}T_{2g}({}^{4}D)$  в ионах  $Mn^{2+}$ .

Кристаллы Rb<sub>2</sub>MnCl<sub>4</sub> при комнатной температуре имеют тетрагональную структуру симметрии D<sub>4h</sub><sup>17</sup>. При температуре ниже  $T_N = 57$  К в кристалле устанавливается антиферромагнитный порядок с анизотропией типа лёгкая ось. Магнитные моменты направлены параллельно C<sub>4</sub> оси симметрии кристалла [2]. Элементарная ячейка при переходе из парамагнитного в антиферромагнитное состояние удваивается, а симметрия понижается до ромбической.

Рассмотрим поляризованные спектры поглощения света кристалла  $Rb_2MnCl_4$  в области энергии ~26 000 см<sup>-1</sup> при температуре T = 4,2 К при приложенном к нему внешнем одноосном давлении, направленном вдоль оси  $C_4$  (рис. 1). Поглощение света в этой области энергии происходит благодаря переходам  ${}^{6}A_{1g}({}^{6}S) \rightarrow {}^{4}T_{2g}({}^{4}D)$  в ионах  $Mn^{2+}$ . Поляризация полос поглощения света, связанных с прямыми переходами (экситонными полосами) и парными экситонмагнонными в этой области спектра, должна соответ-

ствовать правилам отбора, приведённым в [3]. Экситоны симметрии  $\Gamma_2$  («like»), происходящие из состояний электронов  $|T_2, 0\rangle$ , должны наблюдаться в ополяризации, а экситоны симметрии  $\Gamma_5$  («unlike»), происходящие из  $|T_2, -1\rangle$ , – в  $\alpha$ -и  $\pi$ -поляризации. В обозначении состояний электронов  $|\Gamma, M_{\Gamma}\rangle$   $\Gamma$  – орбитальная компонента,  $M_{\Gamma}$  – проекция орбитального момента. При этом экситонные полосы должны быть магнитодипольными и иметь очень маленькую интенсивность. Экситоны  $\Gamma_2$  должны порождать магнонные полосы-спутники электродипольной природы в  $\pi$ -поляризации, а экситонам  $\Gamma_5$  должны сопутствовать магнонные полосы-спутники в  $\alpha$ -и  $\sigma$ -поляризации.



Рис. 1. Изменение спектра поглощения света  $Rb_2MnCl_4$ при температуре T = 4,2 К под действием одноосного давления  $p \perp C_4(\kappa 6ap)$ : 1 – 0; 2 – 0,9; 3 – 1,25; 4 – 0; 5 – 1,25. Направление распространения света  $k \perp C_4$ ; направление вектора электрического поля световой волны E: 1, 2 и 3 –  $E \parallel C_4$  ( $\sigma$ -поляризация); 4, 5 –  $E \perp C_4$  ( $\pi$ -поляризация)

Обнаружить слабые экситонные полосы в спектре не удаётся. Однако косвенно их положение может быть установлено. Для этого можно воспользоваться расчётом изменения положения экситонных полос, происходящих из состояния  ${}^{4}T_{2g}({}^{4}D)$  иона марганца, при учёте спин-орбитального взаимодействия и тетрагональной компоненты кристаллического поля [4]. При использовании базисных функций  $|{}^{4}T_{2g}, M_{\Gamma}, M_{S}\rangle$ диагонализация гамильтониана  $\mathbf{H} = D(M_{\Gamma}^{2} - 2/3) \pm HS_{z} + H_{S}$  даёт зависимость энергии и относительной интенсивности прямых электронных переходов, происходящих из  ${}^{4}T_{2g}({}^{4}D)$ -состояний ионов  $Mn^{2+}$ . Здесь  $H_{S} = \frac{1}{\xi} \sum_{\alpha} s_{\alpha} l_{\alpha}$ ;  $\xi$  – константа спин-орбитальной свя-

зи;  $s_{\alpha}$  и  $l_{\alpha}$  – операторы спинового и орбитального моментов электрона  $\alpha$ ; D – величина тетрагональной компоненты кристаллического поля;  $H = g'\mu_B H_E$  – обменная энергия (g' – g-фактор возбуждённого состояния).

Энергия таких экситонных полос не зависит от величины кубической компоненты кристаллического поля.

Рассмотрим результаты расчёта зависимостей поглощения света для экситонов  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_5$  от величины тетрагональной компоненты кристаллического поля D при H = 120 см<sup>-1</sup> (рис. 2). Положение «0» на шкале абсцисс выбрано условно. При этом выбрано значение параметра спин-орбитальной связи  $\Lambda = 40$  см<sup>-1</sup>, дающее наилучшее согласие поведения экситонных полос при приложении к кристаллу внешнего магнитного поля, переводящего кристалл в спин-флоп фазу (H > 56 кЭ) [5]. Здесь  $\Lambda = -(1/3\sqrt{10})\langle {}^4T_2 | \sum s \cdot l/\xi | {}^4T_2 \rangle$ .

Если выбрать значение тетрагональной компоненты кристаллического поля  $D = 250 \text{ cm}^{-1}$ , то взаимное расположение полос  $D_1$ ,  $D_4$  и  $D_8$  (см. рис. 1) совпадёт со взаимным расположением полос  $E_1$ ,  $E_4$  и  $E_8$ (см. рис. 2). Тогда естественно их следует считать магнонными спутниками экситонных полос  $E_1$ ,  $E_4$ и  $E_8$  соответственно. Это полностью согласуется с правилами отбора для магнонных полос спутников экситонов симметрии  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_5$  [3]. Смешение полос  $D_1$ ,  $D_4$  и  $D_8$  при увеличении давления соответствует изменению энергии экситонных полос  $E_1$ ,  $E_4$  и  $E_8$  при увеличении величины тетрагональной компоненты кристаллического поля. Так, энергия полосы  $E_1$  уменьшается, а полос  $E_4$  и  $E_8$  растёт, что наблюдается и для полос  $D_1$ ,  $D_4$  и  $D_8$ .

Форма экситон-магнонных полос  $D_1$ ,  $D_4$  и  $D_8$  указывает на слабое экситон-магнонное взаимодействие [6]. Поэтому экситонные полосы должны иметь энергию, отличающуюся от энергии экситон-магнонных полос на величину энергии магнона на границе зоны Бриллюэна, т. е. на 80 см<sup>-1</sup> [7]. Наблюдаемые энергии экситон-магнонных полос и вычисленные энергии экситонных полос приведены ниже:

Полоса	E1	E <sub>4</sub>	E <sub>8</sub>	D1	D <sub>4</sub>	$D_8$
Энер- гия (см <sup>-1</sup> )	26 472	24 569	26 691	26 552	26 649	26 771

По смещению положения полос  $D_1$ ,  $D_4$  и  $D_8$ , приняв во внимание поведение экситонов в зависимости от величины тетрагональной компоненты кристаллического поля (см. рис. 2), можно оценить изменение кристаллического поля на поглощающем свет ионе. При величине давления 1,25 кбар изменение тетрагональной компоненты кристаллического поля, оцененное по смещению центра тяжести полосы  $D_1$ , составляет ~5 см<sup>-1</sup>.

Значительное расщепление полосы  $D_1$  достаточно необычно. В кристалле обменное поле ~ $10^3$  кЭ. Внешним давлением, таким, какое было достигнуто в эксперименте, изменить взаимную ориентацию магнитных моментов подрешёток вряд ли возможно. Поэтому природа расщепления полосы – это бетевское расщепление, связанное с понижением симметрии в антиферромагнитной фазе до ромбической и появление анизотропии деформаций в базисной плоскости кристалла при действии одноосного давления.

Таким образом, установлены электронные состояния, порождающие тонкую структуру спектра поглощения света в области переходов  ${}^{6}A_{1g}({}^{6}S) \rightarrow {}^{4}T_{2g}({}^{4}D)$  в ионах  $Mn^{2+}$  кристалла  $Rb_2MnCl_4$  и определены их энергии, а также определено изменение тетрагональной компоненты кристаллического поля на ионе марганца при деформации кристалла под действием одноосного давления.

#### Библиографические ссылки

1. Берсукер И. Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л. : Химия, 1976.

2. Magnetic structure and two-dimensional behavior of  $Rb_2MnCl_4$  and  $Cs_2MnCl_4$  / A. Epstain, E. Gurewitz,

J. Makovsky, H. Shaked // Phys. Rev. 1970. Vol. B2. № 9. P. 3703–3706.

3. Попов Е. А. Симметрийный анализ элементарных возбуждений различных подсистем кристалла // Вестник НИИСУВПТ. Красноярск, 2009.

4. Optical and Magnetic Circular Dichroism Study of the 2D Antiferromagnet Rb2MnCl4 / A. Vervoitte, J. C. Canit, B. Briat, U. Cambli // Phys. Stat. Sol. (b). 1984. Vol. 124. № 1. P. 87–102.

5. Попов Е. А. Оптические и магнитооптические свойства антиферромагнитных хлоридов марганца : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Красноярск, 2004.

6. Попов Е. А., Овчинников С. Г. Магнонные полосы-спутники в оптическом спектре антиферромагнитного  $Rb_2MnCl_4$  // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 8. С. 1429–1431.

7. Попов Е. А. Тонкая структура оптического спектра и многочастичные возбуждения в Rb<sub>2</sub>MnCl<sub>4</sub> // Изв. вузов. Физика. 2003. № 10. С. 10–13.



Рис. 2. Зависимость формы и энергии полос поглощения экситонов, происходящих из электронных состояний: |T<sub>2</sub>, -1⟩ (*слева*) и |T<sub>2</sub>, 0⟩ (*справа*) [4] от тетрагональной компоненты *D* кристаллического поля

#### E. A. Popov

### INFLUENCE OF NONRIGID SUBSYSTEM OF MAGNETIC DIELECTRIC ON ITS OPTICAL SPECTRUM

In the article we discuss results of variations of fine structure of optical spectrum of antiferromagnetic dielectric under uniaxial pressure. Basing on light absorption lines splitting and displacement we determined ion states, initiating light absorption line series and estimated variation of crystal field components at light-absorbing ion.

Keywords: exciton, magnon, light absorption, antiferromagnet.

© Попов Е. А., 2010