

УДК 539.143.4

ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ La В СИСТЕМЕ La₂CuO₄

Галимуллина С.И., Сафонова О.А., Шарипова А.Р., Шайдуллин Ф.Р.,
Ахметзянова Г.И., Погорельцев А.И., Матухин В.Л.

*Казанский государственный энергетический университет
420066, г. Казань, ул. Красносельская, д. 51
e-mail: apogoreltsev@rambler.ru*

Ранее нами было проведено экспериментальное исследование магнитного фазового перехода в купрате лантана La₂CuO₄ с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах ¹³⁹La (спин ядра I = 7/2). Исследовалась температурная зависимость резонансных частот для перехода 5/2-3/2. Было установлено, что температура Нееля изучаемого образца составляла T_N ~ 250К. В настоящей работе полученные частоты были использованы для исследования особенностей формирования градиента электрического поля (ГЭП) на ядрах лантана, а также для изучения распределения электронной плотности (ЭП) в области квадрупольного ядра La в немагнитной фазе (T ~ 270К). Использовался кластерный подход – исследовался кластер La₁₀Cu₅O₂₅ⁿ. Оценки ГЭП на ядрах лантана первоначально были выполнены в рамках самосогласованного ограниченного метода Хартри-Фока с открытыми оболочками (SCF-LCAO-ROHF) с использованием базиса MIDI, затем использовался DFT режим. Резонансные частоты определялись с использованием численного решения соответствующего секулярного уравнения для спина I = 7/2. Ближайшая к фазовому переходу измеренная «немагнитная» резонансная частота составляла ν_Q ~ 12.36МГц.

При проведении предварительных исследований влияния недостатка кислорода на градиент электрического поля (ГЭП) в области ядра La, выяснилось, что отсутствие «парного» кислорода (например, O₃₀ в паре с La₈) резко, практически на порядок, понижает ГЭП (ν_Q ~ 1.2МГц) на лантане. Поэтому можно предположить, что ГЭП на лантане формируется в первую очередь связью La с ближайшим атомом кислорода. В целом связи La-O можно отнести к промежуточному типу.