

УДК 539.143.4

ФОРМИРОВАНИЕ ГЭП НА ЯДРАХ LA В СИСТЕМЕ La_2CuO_4

Сафонова О.А., 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: oilisa12@yandex.ru*

Ранее нами было проведено экспериментальное исследование магнитного фазового перехода в купрате лантана La_2CuO_4 с использованием импульсного метода ядерного квадрупольного резонанса на ядрах ^{139}La (спин ядра $I = 7/2$). Исследовалась температурная зависимость резонансных частот для перехода $5/2 - 3/2$. Было установлено, что температура Нееля изучаемого образца составляла $T_N \sim 250\text{K}$. 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 ($T \sim 270\text{K}$). Использовался кластерный подход – исследовался кластер $\text{La}_{10}\text{Cu}_5\text{O}_{25}^n$. 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 $\nu_Q \sim 12.36\text{МГц}$.

При проведении предварительных исследований влияния недостатка кислорода на градиент электрического поля (ГЭП) в области ядра La, выяснилось, что отсутствие «парного» кислорода (например, O_{30} в паре с La_8) резко, практически на порядок, понижает ГЭП ($\nu_Q \sim 1.2\text{МГц}$) 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.