

ДВАЖДЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ СЕЧЕНИЕ НЕУПРУГОГО МАГНИТНОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ LaCoO_3

А. Д. Федосеев*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 11 марта 2014 г.

Теоретически исследовано дважды дифференциальное сечение неупругого магнитного рассеяния нейтронов на соединении LaCoO_3 в парамагнитной фазе. В рамках эффективного гамильтониана для 5D -терма рассчитаны вклад в рассеяние от высокоспинового состояния иона без магнитного поля и модификация этого вклада при включении магнитного поля. Проведена оценка амплитуды пика в зависимости сечения рассеяния от энергии рассеянных нейтронов, соответствующего переходу из низкоспинового в среднеспиновое состояние.

DOI: 10.7868/S0044451014090259

1. Кобальтиты, как манганиты и купраты, привлекают особенное внимание исследователей последние десятилетия. В кобальтитах ион кобальта находится в трехвалентном состоянии Co^{3+} с электронной конфигурацией внешней оболочки $3d^6$. В соответствии с правилом Хунда ион кобальта должен был находиться в высокоспиновом состоянии со спиновым моментом $S = 2$ и орбитальным моментом $L = 2$. В противоположность этому в сильных кристаллических полях с симметрией, соответствующей окружению иона Co^{3+} в кобальтитах лантана, все электроны должны были бы занимать t_{2g} -орбитали, образуя синглетное немагнитное низкоспиновое состояние с $S = 0$. Таким образом конкуренция внутриатомных и кристаллических полей приводит к малому расщеплению между низкоспиновым (LS), среднеспиновым (IS) и высокоспиновым (HS) состояниями (рис. 1). Это ведет, в свою очередь, к возникновению особенностей в магнитных, электрических и структурных свойствах кобальтитов [1].

Несмотря на то что серия теоретических [2, 3] и экспериментальных работ, включая эксперименты по электронному парамагнитному резонансу (ЭПР) [4], рентгеновской спектроскопии и рентгеновскому круговому дихроизму [5, 6], свидетельствует в пользу конкуренции LS- и HS-состояний,

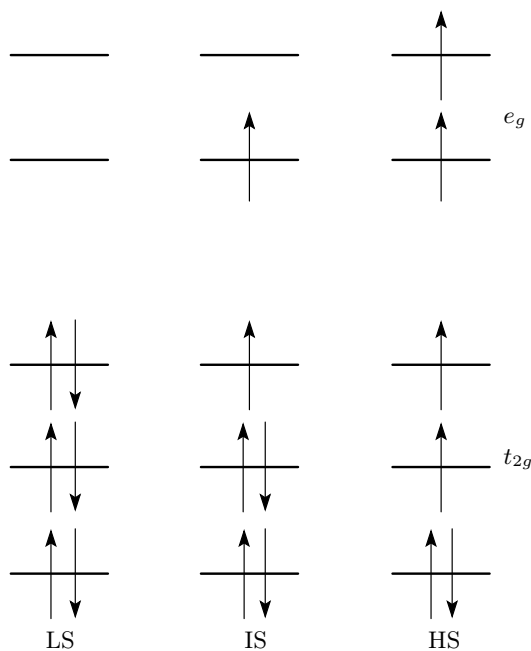


Схема электронной конфигурации низкоспинового (LS), среднеспинового (IS) и высокоспинового (HS) состояний иона Co^{3+} [1]

некоторые эксперименты, как, например, измерение намагниченности [7] и восприимчивости [8], указывают на возможное смешивание этих состояний с IS-состоянием. Также серия теоретических работ,

*E-mail: fad@iph.krasn.ru

учитывающих гибридизацию $3d$ -орбиталей кобальта и $2p$ -орбиталей кислорода, продемонстрировала стабилизацию IS-состояния [9, 10]. Дополнительную информацию по данному вопросу могут дать эксперименты по неупругому нейтронному рассеянию, которые зарекомендовали себя при исследовании магнитных ионов [11] и, в частности, эффектов влияния кристаллического поля на них [12].

В работе представлен теоретический расчет дважды дифференциального сечения неупругого магнитного рассеяния нейтронов, который может помочь в постановке и последующей интерпретации эксперимента.

2. Дважды дифференциальное сечение магнитного нейтронного рассеяния (в расчете на один узел) в первом борновском приближении имеет вид [13, 14]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = r_0^2 \frac{k'}{k} S(\kappa, E), \quad (1)$$

$$S(\kappa, E) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta} \sum_{\lambda\lambda'} p_{\lambda} \langle \lambda | \hat{F}_{l\alpha}^+ | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \hat{F}_{l'\beta} | \lambda \rangle \times \delta(E - E_{\lambda'} + E_{\lambda}) e^{i\kappa(l'-l)}.$$

Здесь введены обозначения

$$G_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\nu} p_{\nu} \langle \nu | (\sigma_{\alpha} - e_{\alpha}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})) + (\sigma_{\beta} - e_{\beta}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})) | \nu \rangle, \quad (2)$$

$$\hat{F}_{l\alpha} = \frac{1}{2\mu_B} \int \widehat{M}_{l\alpha}(\mathbf{r}) e^{i\kappa(\mathbf{r}-\mathbf{l})} d\mathbf{r}, \quad (3)$$

где M_l — намагниченность, обусловленная спиновыми и орбитальными моментами электронов иона в позиции \mathbf{l} , $r_0 = \gamma_n e^2 / m_e c^2$, $\gamma_n = -1.91348$ — гиромагнитное отношение для нейтрона, $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ — вектор рассеяния, $\mathbf{e} = \kappa / \kappa$, σ_{α} — матрицы Паули, действующие в пространстве спиновых состояний нейтрона, $|\nu\rangle$ — спиновые части волновых функций нейтрона, p_{ν} — статистический вес соответствующего состояния в пучке, $|\lambda\rangle$ — состояние рассеивателя, p_{λ} — его статистический вес.

Соединение LaCoO_3 является парамагнитным диэлектриком в широком диапазоне температур [15], а при $T \rightarrow 0$ переходит в немагнитное состояние. Связано это с тем, что основное состояние иона Co^{3+} в кобальтите лантана — немагнитное и отделено от магнитных состояний энергией активации $\tilde{\Delta} \sim 100$ К. В результате, при температурах $T < \tilde{\Delta}$ обменным взаимодействием между магнитными ионами следует пренебречь ввиду низкой заселенности IS- и HS-состояний, а при больших температурах возникновению магнитного порядка мешают тепловые флуктуации. Таким образом, при

температурах $T < 600$ К приближение парамагнетика без взаимодействия между ионами для случая LaCoO_3 можно считать хорошо выполняющимся.

В выражении (1) λ и λ' описывают состояния всего рассеивателя, а не отдельного иона. В таком случае для парамагнетика без взаимодействия произведение матричных элементов, входящих в сумму (1), отлично от нуля только в случаях $l = l'$ или $\lambda = \lambda'$. Последнее условие отвечает исключительно упругому нейтронному рассеянию, которое в данной работе рассматриваться не будет. В связи с этим выражение (1) можно переписать в более простом виде:

$$S(\kappa, E) = \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta} \sum_{nn'} p_n \langle n | \hat{F}_{\alpha}^+ | n' \rangle \times \langle n' | \hat{F}_{\beta} | n \rangle \delta(E - E_{n'} + E_n), \quad (4)$$

где n и n' — состояния иона кобальта. Это выражение соответствует независимому рассеиванию на ионах кобальта и справедливо для неупругого рассеяния на невзаимодействующих ионах в парамагнитной фазе в том числе и в случае приложенного внешнего магнитного поля.

После ввода средних значений проекции поляризации пучка [14] $P_{\alpha} = \sum_{\nu} p_{\nu} \langle \nu | \sigma_{\alpha} | \nu \rangle$ коэффициенты $G_{\alpha\beta}$ приобретают явный вид

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta} + i \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} e_{\gamma} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{e}), \quad (5)$$

где $0 \leq P \leq 1$, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — символ Леви-Чивиты.

Во многих случаях формулу (4) можно упростить. Так, если спин-орбитальное взаимодействие значительно превышает расщепление в кристаллическом поле, то векторный формфактор \mathbf{F} может быть переписан в представлении полного момента. В противоположном случае, когда кристаллическое поле значительно превышает по величине спин-орбитальное взаимодействие, орбитальный момент «заморожен» и достаточно учитывать лишь неупругое рассеяние на спиновом моменте иона. В рассматриваемом случае кобальтита лантана оба взаимодействия имеют один порядок величины и вклад в неупругое магнитное рассеяние нейтронов будет давать рассеяние как на спиновом моменте, так и на орбитальном. В связи с этим необходимо найти точные волновые функции для вычисления матричных элементов $\langle n | \hat{F}_{\alpha} | n' \rangle$.

3. В случае соединения LaCoO_3 наименьшей энергией обладает синглетный уровень LS-состояния, не дающий вклада в неупругое магнитное рассеяние нейтронов с низкими энергиями. Как показали исследования ЭПР, у HS-состояния наименьшей

энергией обладает триплет, расщепленный кристаллическим полем ближайшего окружения на однократно и двукратно вырожденные уровни. Поскольку расщепление $\Delta E \sim 7.2$ К, вклад в магнитное нейтронное рассеяние, обусловленный переходами между этими уровнями, должен быть значительным.

Для нахождения волновых функций иона кобальта в LaCoO_3 использовалась модель, предложенная в работе [16]. Гамильтониан при этом представлялся в виде

$$\hat{H} = H_{cub} + \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + B_2^0 O_2^0(L, L_z) - \mu_B \mathbf{H} \cdot (2\mathbf{S} + \mathbf{L}), \quad (6)$$

$$H_{cub} = -\frac{2}{3} B_4 \left(O_4^0(L, L_z) - 20\sqrt{2} O_4^3(L, L_z) \right),$$

где первое слагаемое описывает кристаллическое поле кубической симметрии, второе — спин-орбитальное взаимодействие, третье слагаемое — кристаллическое поле тригональной симметрии, четвертое — взаимодействие иона с внешним магнитным полем, а ось z направлена вдоль тригональной оси. Характерные величины, полученные из эксперимента по ЭПР: $B_4 = 200$ К, $\lambda = -185$ К, $B_2^0 = 7.2$ К.

Последовательно учитывая все члены гамильтониана (6) и каждый раз вычисляя волновые функции в рамках теории возмущений для вырожденного уровня в нулевом приближении, мы получили волновые функции, характеризующие нижний триплет HS-состояния в отсутствие магнитного поля:

$$\begin{aligned} |\tilde{0}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{5}}|2, 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|-1, 1\rangle + \sqrt{\frac{4}{10}}|0, 0\rangle + \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{5}}|-2, -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|1, -1\rangle, \\ |\tilde{1}\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{5}}|2, 2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|-1, 2\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}|0, 1\rangle + \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{15}}|-2, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{30}}|1, 0\rangle, \\ |\tilde{-1}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{5}}|-2, -2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|1, -2\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}|0, -1\rangle - \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{15}}|2, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{30}}|-1, 0\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

При этом энергетическая щель между состояниями $|\tilde{0}\rangle$ и $|\tilde{\pm 1}\rangle$ составляет $\Delta E_0 = 9B_2^0/10 \approx 7$ К. Здесь волновые функции триплета выражены через волновые функции свободного иона $|L_z, S_z\rangle$.

Приложение сильного магнитного поля может существенно изменить картину, особенно если поле направлено под углом к тригональной оси:

$$H_z = H \cos \theta, \quad H_x = H \sin \theta \cos \phi,$$

$$H_y = H \sin \theta \sin \phi.$$

При этом поля $H \sim 3$ Тл уже можно считать сильными. Набор энергий (в первом приближении по B_2^0/H) и волновых функций (в нулевом приближении) в таком случае записывается в виде

$$E_0 = \frac{3}{10} B_2^0 (1 - 3 \cos^2 \theta),$$

$$\psi_0 = -\frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta |\tilde{1}\rangle + \cos \theta |\tilde{0}\rangle + \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} \sin \theta |\tilde{-1}\rangle, \quad (8)$$

$$E_1 = \frac{3}{10} B_2^0 \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \right) - g \mu_B H,$$

$$\psi_1 = \frac{e^{-i\phi}}{2} \frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta - 1} |\tilde{1}\rangle - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} |\tilde{0}\rangle - \frac{e^{i\phi}}{2} \frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta + 1} |\tilde{-1}\rangle, \quad (9)$$

$$E_{-1} = \frac{3}{10} B_2^0 \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \right) + g \mu_B H,$$

$$\psi_{-1} = \frac{e^{-i\phi}}{2} \frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta + 1} |\tilde{1}\rangle - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} |\tilde{0}\rangle - \frac{e^{i\phi}}{2} \frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta - 1} |\tilde{-1}\rangle, \quad (10)$$

где $g = 3.5$, что не сильно отличается от полученного в эксперименте по ЭПР $g = 3.35$.

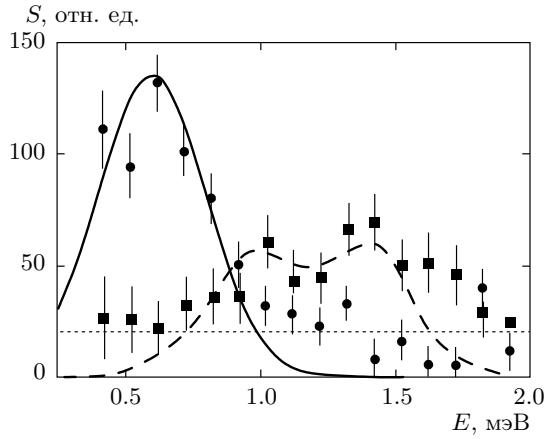
В случае магнитного рассеяния нейтронов, характеризующегося малыми векторами рассеяния κ , на ионе кобальта можно ограничиться дипольным приближением. Это приближение может давать существенные ошибки при расчете амплитуд рассеяния на одноэлектронных оболочках в сильных магнитных полях, однако в случае заполнения оболочки, близкого к половинному, дает незначительную погрешность. В таком случае

$$\mathbf{F} = \langle j_0(\kappa) \rangle \mathbf{S} + \frac{1}{2} (\langle j_0(\kappa) \rangle + \langle j_2(\kappa) \rangle) \mathbf{L},$$

$$\langle j_K(\kappa) \rangle = \int r^2 R_{nl}^2 j_K(\kappa r) dr, \quad (11)$$

где $j_K(x)$ — сферическая функция Бесселя, R_{nl} — радиальная часть водородоподобной волновой функции электрона на орбитали с главным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом l . Для случая $3d$ -электронов она имеет вид

$$R_{3d} = \sqrt{\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{1}{6!} \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2} e^{-r/3a_0}. \quad (12)$$



Дважды дифференциальное сечение неупругого магнитного рассеяния на LaCoO_3 в относительных единицах при $T = 50$ К. Сплошная линия соответствует расчету для поликристаллического образца при $H = 0$, штриховая — при $H = 6$ Тл, точки и квадраты — данные из эксперимента [17]

Используя это приближение, легко получить искомое выражение для дважды дифференциального сечения неупругого магнитного рассеяния в LaCoO_3 . В отсутствие магнитного поля функция $S(\kappa, E)$ (4) будет иметь вид

$$S(\kappa, E) = A_0 [p_0 \delta(E - \Delta E_0) + p_1 \delta(E + \Delta E_0)],$$

$$A_0 = 2K(1 + e_z^2), \quad \Delta E_0 = \frac{9}{10} B_2^0, \quad (13)$$

$$K = \frac{(7\langle j_0(\kappa) \rangle + \langle j_2(\kappa) \rangle)^2}{32}.$$

В сильных магнитных полях, $H > 3$ Тл:

$$S(\kappa, E) =$$

$$= A_+ [p_0 \delta(E - \Delta E_1) + p_{-1} \delta(E + \Delta E_{-1})] +$$

$$+ A_- [p_0 \delta(E - \Delta E_{-1}) + p_1 \delta(E + \Delta E_1)],$$

$$A_{\pm} = K(1 + e_{\parallel}^2) \pm 2K e_{\parallel} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{e}), \quad (14)$$

$$\Delta E_1 = \frac{9}{10} B_2^0 \left(\cos^2 \theta - \frac{\sin^2 \theta}{2} \right) - g\mu_B H,$$

$$\Delta E_{-1} = \frac{9}{10} B_2^0 \left(\cos^2 \theta - \frac{\sin^2 \theta}{2} \right) + g\mu_B H,$$

e_{\parallel} — проекция вектора \mathbf{e} на направление магнитного поля, $p_0 \sim \exp(-\tilde{\Delta}/T)$, $p_{\pm 1} \sim \exp(-\tilde{\Delta}/T) \times \exp(\mp \Delta E_{\pm 1}/T)$, где $\tilde{\Delta} \approx 140$ К — энергия активации перехода между LS- и HS-состояниями.

Сравнение расчетных кривых для поликристаллического случая и экспериментальных данных

представлено на рис. 2. При расчете учитывалось, что ось z кобальта направлена произвольно по отношению к направлению магнитного поля и нейтронному пучку, а уширение δ -пиков задавалось функцией Гаусса с $\sigma = 0.1$ мэВ для случая рассеяния в присутствии магнитного поля и $\sigma = 0.2$ мэВ в отсутствие, что согласуется с погрешностью эксперимента, указанной в работе [17]. Незначительные расхождения связаны с отмеченной авторами работы [17] проблемой выделения непосредственно неупругих пиков на фоне сильного сигнала, вызванного упругим рассеянием, и с недостаточностью данных о геометрии эксперимента, таких как угол рассеяния и угол между магнитным полем и падающим пучком.

4. Характерной особенностью LaCoO_3 является небольшое расщепление между термами 5D , дающим HS-состояние, 1H , отвечающим LS-состоянию, и, возможно, 3G , соответствующим IS-состоянию. Несмотря на все преимущества, ЭПР имеет существенное ограничение: он позволяет измерить энергетические щели между состояниями с различной проекцией полного момента, но не проявляет пики, связанные с переходами между состояниями с различным значением полного момента. В отличие от ЭПР, при магнитном рассеянии нейтронов не накладывается ограничение на начальное и конечное состояния, и амплитуда пиков в дважды дифференциальном сечении неупругого магнитного нейтронного рассеяния, отвечающих переходам между различными термами, может быть отлична от нуля. В связи с этим представляется важной оценка амплитуд пиков в дважды дифференциальном сечении неупругого магнитного рассеяния нейтронов, соответствующих переходам $LS \rightarrow HS$ и $LS \rightarrow IS$, поскольку она позволит определить, возможно ли обнаружение этих пиков в эксперименте.

Поскольку рассмотренные термы различаются значениями спиновых моментов, вклады от орбитальных слагаемых, входящих в матричные элементы $\langle n' | \hat{F}_\alpha | n \rangle$, равны нулю, если $|n\rangle$ и $|n'\rangle$ соответствуют состояниям для различных термов. В таком случае выражение для матричных элементов приобретает простой вид:

$$\langle n' | \mathbf{F} | n \rangle = \langle n' | \sum_j \mathbf{s}_j e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}_j} | n \rangle, \quad (15)$$

где сумма по j ведется по всем электронам частично заполненной оболочки иона, а \mathbf{s}_j — одноэлектронные спиновые операторы.

В интересующем нас случае, когда электрон находится на $3d$ -орбитали, матричные элементы $\langle m' | e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} | m \rangle$ можно вычислить точно:

$$\begin{aligned}
 \langle 0|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|\mp 1\rangle &= \mp \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{\tilde{\kappa}^2 e_z \sqrt{1-e_z^2}}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} \times \\
 &\quad \times [1+6\tilde{\kappa}^2-15\tilde{\kappa}^2 e_z^2] e^{\mp i\phi_\kappa}, \\
 \langle \pm 2|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|\pm 1\rangle &= \pm \frac{4\tilde{\kappa}^2 e_z \sqrt{1-e_z^2}}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} \times \\
 &\quad \times [2-3\tilde{\kappa}^2+5\tilde{\kappa}^2 e_z^2] e^{\mp i\phi_\kappa}, \\
 \langle \pm 1|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|\mp 1\rangle &= \frac{4\tilde{\kappa}^2(1-e_z^2)}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} \times \\
 &\quad \times [1+\tilde{\kappa}^2-10\tilde{\kappa}^2 e_z^2] e^{\mp 2i\phi_\kappa}, \\
 \langle \pm 2|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|0\rangle &= \frac{4}{\sqrt{6}} \frac{\tilde{\kappa}^2(1-e_z^2)}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} \times \\
 &\quad \times [2-3\tilde{\kappa}^2+15\tilde{\kappa}^2 e_z^2] e^{\mp 2i\phi_\kappa}, \\
 \langle \pm 1|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|\mp 2\rangle &= \mp \frac{20\tilde{\kappa}^4 e_z \sqrt{1-e_z^2}}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} e^{\mp 3i\phi_\kappa}, \\
 \langle \pm 2|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|\mp 2\rangle &= \frac{10\tilde{\kappa}^4(1-e_z^2)^2}{(1+\tilde{\kappa}^2)^6} e^{\mp 4i\phi_\kappa}, \\
 e^{\mp i\phi_\kappa} &= \frac{\tilde{\kappa}_x \mp i\tilde{\kappa}_y}{|\tilde{\kappa}_x \mp i\tilde{\kappa}_y|} = \frac{e_x \mp ie_y}{\sqrt{1-e_z^2}}, \\
 \tilde{\kappa} &= \kappa \frac{3}{2a_0}.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Следует отметить, что дипольное приближение в принципе не применимо для описания пика, обусловленного рассеянием с изменением терма, поскольку соответствующие матричные элементы обращаются в нуль в этом приближении.

В многоэлектронном случае задача сводится к одноэлектронному случаю путем перехода к представлению вторичного квантования [18], в котором спиновая часть оператора \mathbf{F} будет иметь вид

$$\begin{aligned}
 F_- &= \sum_{m'm} d_{m'\downarrow}^\dagger d_{m\uparrow} f_{m'm}, \\
 F_+ &= \sum_{m'm} d_{m'\uparrow}^\dagger d_{m\downarrow} f_{m'm}, \\
 F_z &= \sum_{m'm\sigma} \sigma d_{m'\sigma}^\dagger d_{m\sigma} f_{m'm}, \\
 f_{m'm} &= \langle m'|e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}}|m\rangle.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Особенности симметрии многоэлектронной системы таковы, что все матричные элементы $\langle HS|\mathbf{F}|LS\rangle$ обращаются в нуль, поэтому пронаблюдать в эксперименте по неупругому магнитному нейтронному рассеянию переход между этими двумя состояниями невозможно. Матричные элементы $\langle IS|\mathbf{F}|LS\rangle$ отличны от нуля и, если IS-состояние обладает энергией, сравнимой с энергиями LS- и HS-состояний, то соответствующий пик можно обнаружить в дважды дифференциальном сечении магнитного рассеяния нейтронов.

При нахождении величины пика предполагалось, что все энергетические величины, входящие в гамильтониан (6), для IS-состояния те же, что и для HS. В таком случае выражения для искомым матричных элементов (15) будут иметь вид

$$\begin{aligned}
 \langle IS|F_z|LS\rangle &= -0.3062i|f_{2-1}|\sin\phi_\kappa, \\
 \langle IS|F_x|LS\rangle &= i(-0.0722|f_{21}|\sin\phi_\kappa + \\
 &\quad +0.1768|f_{10}|\sin\phi_\kappa + 0.1250|f_{20}|\sin 2\phi_\kappa - \\
 &\quad -0.1021|f_{1-1}|\sin 2\phi_\kappa + 0.1021|f_{2-2}|\sin 4\phi_\kappa), \\
 \langle IS|F_y|LS\rangle &= i(0.0722|f_{21}|\cos\phi_\kappa - 0.1768 \times \\
 &\quad \times |f_{10}|\cos\phi_\kappa + 0.1250|f_{20}|\cos 2\phi_\kappa - \\
 &\quad -0.1021|f_{1-1}|\cos 2\phi_\kappa - 0.1021|f_{2-2}|\cos 4\phi_\kappa).
 \end{aligned} \tag{18}$$

В случае поликристаллического образца амплитуда пика в дважды дифференциальном сечении неупругого магнитного рассеяния нейтронов, соответствующего переходу $LS \rightarrow IS$, может составлять $\sim 10^{-1}-10^{-2}$ от амплитуды хорошо наблюдаемого экспериментаторами пика, обусловленного переходами внутри расщепленного триплета в HS-состоянии. Обнаружение подобного пика решило бы вопрос о реализации IS-состояния Co в соединении LaCoO₃.

5. В заключение отметим основные результаты работы. В рамках гамильтониана, предложенного [16] для описания эксперимента по ЭПР, рассчитаны амплитуды и положения пиков, обусловленных переходами внутри нижнего триплета HS-состояния иона кобальта. Сравнение с экспериментом показало хорошее соответствие между теоретическим расчетом и экспериментальными данными. Показано, что если IS-состояние обладает энергией, сравнимой с энергиями LS- и HS-состояний, то пик, соответствующий переходу из LS- в IS-состояние, должен наблюдаться. В предположении, что гамильтониан, описывающий IS-состояние, содержит те же энергетические параметры, что и гамильтониан HS-состояния, получена оценка амплитуды пика, соответствующего переходу иона кобальта из LS- в IS-состояние.

Автор выражает благодарность В. В. Валькову, Е. С. Клементьеву и П. А. Алексею за многочисленные дискуссии и постоянное внимание к работе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 13-02-00523 А, 14-02-31280 мол_а, 13-02-98013).

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов и др., УФН **179**, 837 (2009).
2. Y. Tanabe and S. J. Sugano, J. Phys. Soc. Jpn. **9**, 766 (1954).
3. Z. Ropka and R. J. Radwanski, Physica B **312**, 777 (2002).
4. S. Noguchi, S. Kawamata, and K. Ohuda, Phys. Rev. B **66**, 094404 (2002).
5. M. W. Haverkort, Z. Hu, J. C. Cezar et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 176405 (2006).
6. M. Medarde, C. Dallera, M. Grioni et al., Phys. Rev. B **73**, 054424 (2006).
7. K. Sato, A. Matsuo, K. Kindo et al., J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 093702 (2009).
8. T. Saitoh, T. Mizokawa, A. Fujimori et al., Phys. Rev. B **55**, 4257 (1997).
9. С. Г. Овчинников, Ю. С. Орлов, ЖЭТФ **131**, 485 (2007).
10. L. Craco and E. Muller-Hartmann, Phys. Rev. B **77**, 045130 (2008).
11. В. Н. Лазуков, П. А. Алексеев, Н. Н. Тиден и др., Письма в ЖЭТФ **76**, 353 (2002).
12. Е. В. Нефедова, Н. Н. Тиден, К. Сименсмейер и др., ЖЭТФ **132**, 19 (2007).
13. R. Ballou, arXiv:0706.0335v1.
14. S. W. Lovesey, *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter*, Vol. 2, Clarendon Press, Oxford (1986), p. 310.
15. M. Tachibana, T. Yoshida, H. Kawaji et al, Phys. Rev. B **77**, 094402 (2008).
16. Z. Ropka and R. J. Radwanski, Phys. Rev. B **67**, 172401 (2003).
17. A. Podlesnyak, S. Streule, J. Mesot et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 247208 (2006).
18. С. Реймс, *Теория многоэлектронных систем*, Мир, Москва (1976).