

- [3] Бродин М. С., Блонский И. В., Каратаев В. Н., Деркач Б. Е., Савчук А. И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 1723—1729.
 [4] Miura N., Kido G., Chikazumi S. // Techn. Rept. ISSP. 1978. Ser. A. N 902. P. 1—20.

Вильнюсский государственный
 университет им. В. Капсукаса
 Вильнюс
 Черновицкий государственный
 университет
 Черновцы

Поступило в Редакцию
 28 ноября 1988 г.
 В окончательной редакции
 14 апреля 1989 г.

УДК 535.342.2

Физика твердого тела, том 31, в. 9, 1989
 Solid State Physics, vol. 31, N 9, 1989

ТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛА LiI

А. В. Шерман

В низкотемпературных спектрах отражения хлоридов и бромидов щелочных металлов в окрестности экситонных пиков наблюдается тонкая структура, имеющая вид одного или нескольких почти эквидистантных максимумов или ступенек [1-3]. Характерный частотный параметр структуры — расстояние между максимумами (ступеньками) или между максимумом и главным пиком — для нижайших пиков большинства указанных кристаллов в полтора-два раза превосходит частоты LO -фононов. Исключение составляют кристаллы LiI и LiBr, где эти частоты заметно больше и близки к частотным параметрам структуры. В работах [4, 5] на основании качественного сходства вычисленных там спектров поглощения со спектрами указанных кристаллов было высказано предположение, что отмеченная структура связана с колебательными состояниями автолокализованного экситона. Для проверки этого предположения следует провести более строгое количественное сопоставление экспериментальных и теоретических форм спектров, а также сравнить их температурное изменение. Это и является целью данного сообщения.

Для проведения такого сопоставления выбран кристалл LiI, для описания спектров которого (ввиду отмеченной близости параметра структуры к частоте фонона) можно использовать линейный по фононным амплитудам гамильтониан экситон-фононного взаимодействия. Полагая, что основную роль в формировании указанного участка спектра играет взаимодействие экситона с оптическими фононами, в качестве гамильтониана экситон-фононной системы примем следующий:

$$H = -\frac{B}{12} \sum_n \sum_a' a_{n+a}^+ a_n + \hbar\omega \sum_n b_n^+ b_n + \sqrt{S/\hbar\omega} \sum_n a_n^+ a_n (b_n + b_n^+), \quad (1)$$

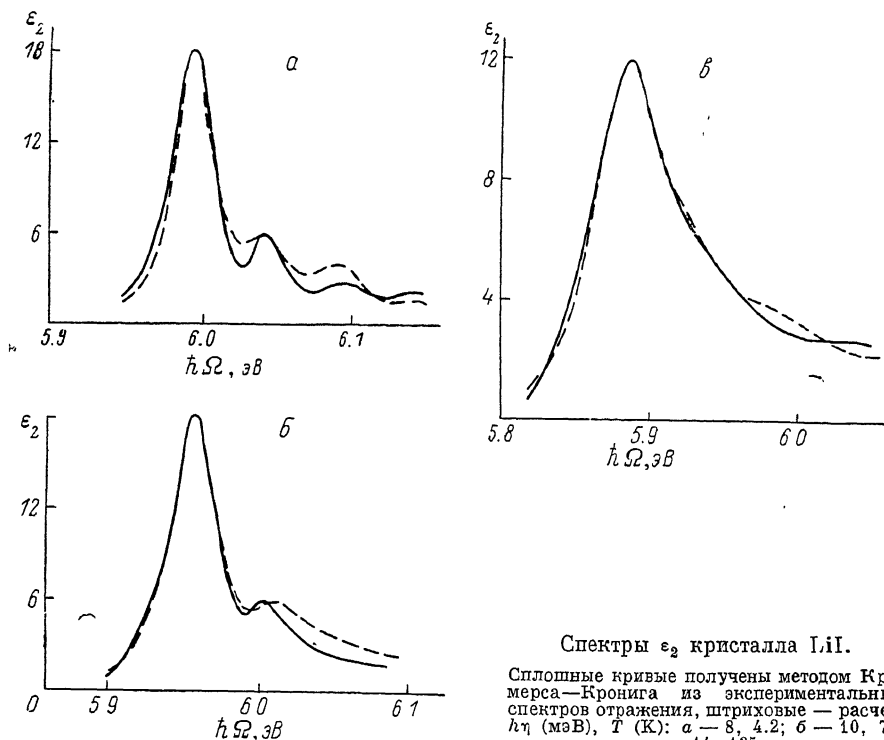
где a_n^+ , b_n^+ — операторы рождения экситона и фонона на узле n решетки; B , ω , S — ширина зоны, частота бездисперсного оптического фонона и стоксов сдвиг. Используя (1), мы пренебрегаем индуцированными фононами переходами между состояниями различных зон и предполагаем, что экситон движется в основном по одной из подрешеток. Короткодействующее (ввиду электронейтральности экситона) взаимодействие с фононами моделируется контактным слагаемым. Использование в расчете вместо гранецентрированной простой кубической решетки слабо изменяет вид спектров [5], но ведет к существенному упрощению программы. \sum_a' означает суммирование по ближайшим соседям.

Параметры B и S в (1) могут быть оценены по известным значениям коэффициента наклона урбаховского хвоста σ и высоты автолокализационного барьера [3] с помощью формул работ [5, 6]: $B = 0.7 \div 1.1$ эВ,

$S=0.45 \div 0.8$ эВ (разброс связан с тем, что коэффициент s в формуле $\sigma = sB/S$ [7] не является строго константой [5]). Заметим, что полученная оценка B близка к значению ширины верхней валентной зоны 1.2 эВ, найденному в работе [8].

Вклад рассматриваемого экситонного перехода в мнимую часть диэлектрической проницаемости с точностью до несущественных множителей и в пренебрежении пространственной дисперсией может быть представлен в виде

$$A(\Omega) = \text{Re} \int_0^{\infty} dt e^{(i\Omega - \eta)t} \langle a_0(t) a_0^\dagger \rangle, \quad (2)$$



Спектры ϵ_2 кристалла LiI.

Сплошные кривые получены методом Крамерса—Кронига из экспериментальных спектров отражения, штриховые — расчет. $\hbar\eta$ (мэВ), T (К): а — 8, 4.2; б — 10, 78; в — 14, 135.

где Ω — частота света; a_0^\dagger — оператор рождения экситона ∇ с нулевым волновым вектором; $a_0(t) = \exp(iHt/\hbar)a_0 \exp(-iHt/\hbar)$; угловые скобки означают усреднение по каноническому ансамблю с гамильтонианом (1); η^{-1} — время жизни состояний, обусловленное взаимодействием с фононами других ветвей и дефектами. Коррелятор (2) вычислялся с помощью рекурсивного метода [5, 9], являющегося регулярной процедурой нахождения элементов цепной дроби, представляющей коррелятор. Результаты для трех значений температуры приведены на рисунке вместе с зависимостями $\epsilon_2(\Omega)$, полученными по методу Крамерса—Кронига из спектров отражения работы [2]. Значения B и S выбраны из указанных интервалов: $B=0.77$ эВ, $S=0.61$ эВ. Масштаб оси частот расчетных кривых определен по расстоянию между двумя низкочастотными пиками экспериментального спектра при $T=4.2$ К. Найденное при этом значение $\hbar\omega = 40.5$ мэВ близко к энергии LO -фононов [3]. Поскольку теория не учитывает сдвиг зон за счет термического расширения кристалла, положение расчетных кривых в шкале частот определялось подгонкой положений главных максимумов спектров, а параметр η — подгонкой полуширин этих максимумов.

Расчетные кривые по положению и интенсивности структуры удовлетворительно согласуются с экспериментальными, что подтверждает высказывавшиеся ранее предположения о природе этой структуры. Касаясь

других подидов, для которых частотный параметр структуры существенно превосходит предельные частоты кристаллических фононов, можно предположить, что образование квазимолекулы при автолокализации экситона [10] ведет к возникновению локального колебания, кванты которого и проявляются в спектре. Поскольку частота этого колебания определяется в основном галоидом, близость частотных параметров структуры подидов [1-3] говорит в пользу этого предположения.

Отметим в заключение, что близкую к изображенной форму спектров можно получить и при некоторых других значениях параметров B и S из указанных интервалов (см., например, рис. 6 в [5]).

Я признателен А. А. О'Коннелль-Броннину за обсуждение экспериментальных результатов и Г. С. Завту за предоставление программы расчета оптических констант по методу Крамерса—Кронига.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Baldini G., Bosacchi A., Bosacchi B. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 23. N 15. P. 846—848; Baldini G., Bosacchi B. // Proc. X European Congress Molec. Spectr. 1970. P. 305—324; Miyata T. // J. Phys. Soc. Jap. 1971. V. 31. N 2. P. 529—551.
- [2] О'Коннелль-Бронин А. А. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 9. С. 2603—2610.
- [3] Nishimura H., Saka Y., Nagata S., Hashimoto S., Okada T., Komatsu T. // J. Phys. Soc. Jap. 1987. V. 56. N 10. P. 3715—3725.
- [4] Sumi H. // J. Phys. Soc. Jap. 1974. V. 36. N 3. P. 770—779; 1975. V. 38. N 3. P. 825—835.
- [5] Sherman A. V. // Phys. St. Sol. B. 1988. V. 145. N 1. P. 319—332.
- [6] Hízhnyakov V. V., Sherman A. V. // Czech. J. Phys. B. 1982. V. 32. N 1. P. 58—68.
- [7] Sumi H., Toyozawa Y. // J. Phys. Soc. Jap. 1971. V. 31. N 2. P. 342—358.
- [8] Kunz A. B. // Phys. Rev. 1969. V. 180. N 3. P. 934—941.
- [9] Sherman A. V. // J. Phys. A. 1987. V. 20. N 3. P. 569—576.
- [10] Луцик Ч. Б. Экситоны. М., 1985. С. 362—384.

Институт физики АН ЭССР
Тарту

Поступило в Редакцию
17 апреля 1989 г.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА Rb_2ZnCl_4 В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ В ОБЛАСТИ НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЫ

В. В. Гладкий, В. А. Кириков, С. К. Гупта,
И. Э. Липиньски, Е. С. Иванова

Эффекты последействия (памяти) в области несоразмерной фазы (Н-фазы) сегнетоэлектрика, существенно отличающие ее от обычных (соразмерных) фаз, обусловлены переходом кристалла после некоторых однократных внешних воздействий (тепловых, электрических, механических) в новые метастабильные состояния, являющиеся результатом «закрепления» изменившейся солитонной структуры на неоднородностях решетки [1, 2]. Существенно, что внешние воздействия активно изменяют плотность солитонов n_s и свойства кристалла до тех пор, пока это изменение идет в одном направлении (с повышением или понижением n_s). Если же воздействие стремится изменить знак приращения Δn_s , солитонная структура «сопротивляется» перестройке и кристалл длительное время остается в прежнем состоянии [2]. Анализ экспериментальных результатов [2] показывает, что, по-видимому, причиной различной реакции кристалла в этих двух случаях является различная степень неравновесности состоя-