

тронейтральности вероятнее всего происходит перезарядка ионов  $\text{Cr}^{3+}$  в  $\text{Cr}^{4+}$ . Поскольку этот процесс происходит при участии ионов серебра и хрома, логично предположить, что в кристаллической решетке сплава вышеперечисленные ионы должны располагаться достаточно близко к одному и тому же иону серы.

### Список литературы

- [1] Никифоров К. Г., Радауцан С. И., Тезляван В. Е. Сульфохромит кадмия. Кишинев: Штиинца, 1981. 126 с.
- [2] Гуревич А. Г., Байрамов А. И., Эмирян Л. М., Капустин В. А., Яковлев Ю. М. // Сб. «Магнитные полупроводниковые шпинели типа  $\text{CdCr}_2\text{Se}_4$ ». Кишинев: Штиинца, 1978. С. 30—43.
- [3] Эмирян Л. М., Гуревич А. Г., Шукюров А. С., Бержанский В. Н. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 10. С. 2916.
- [4] Альтшуллер С. А., Козырев Б. М. Электронный парамагнитный резонанс соединенных элементов промежуточных групп. М.: Мир, 1972. 672 с.
- [5] Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М.: Мир, 1975. 548 с.
- [6] Радауцан С. И., Мадан И. А., Ременко С. Д., Тезляван В. Е. // Тез. докл. II Всес. симп. по процессам роста и синтеза кристаллов и пленок полупроводниковых соединений. Новосибирск, 1969. С. 128.

Институт прикладной физики  
АН МССР  
Кишинев

Поступило в Редакцию  
2 января 1989 г.  
В окончательной редакции  
26 мая 1989 г.

УДК 537.226

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

## СТРОЕНИЕ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

Б. М. Даринский, А. П. Лазарев, А. С. Сидоркин

Подвижность доменных границ в сегнетоэлектрических кристаллах, определяемая как способностью ее преодоления решеточного потенциального рельефа, так и их взаимодействием с дефектами кристаллической решетки, существенно зависит от ширины доменной стенки. Величина последней как в макроскопическом [1], так и в микроскопическом [2-4] подходах всегда определяется только в объеме кристалла. В то же время, очевидно, что для описания электрических эффектов доменного происхождения, связанных с изменением поляризации вблизи поверхности, необходимо знание строения доменных границ в этой области.

Будем исходить из простейшей модели термодинамического потенциала, заменяющей зависимость  $\Phi(P) = (\alpha/2) P^2 + (\beta/4) P^4$  двумя смещенными параболой. Тогда исходное материальное уравнение для одноосного сегнетоэлектрика с сегнетоактивной осью  $Oz$  можно записать в виде

$$2\alpha(P - P_0(x, z)) + \kappa \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = - \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad (1)$$

где  $\alpha = \alpha_0(T_0 - T)$ ,  $\alpha_0 = 2\pi/C$ ,  $C$  — постоянная Кюри,  $T_0$  — температура Кюри,  $\kappa$  — корреляционный параметр,  $\varphi$  — потенциал электрического поля зарядов спонтанной поляризации. Вблизи поверхности сегнетоэлектрика для  $P_0(x, z)$  можно записать

$$P_0(x, z) = P_0 \cdot f(\mathbf{x}) \cdot \Theta(z), \quad (2)$$

где  $\Theta(z) = 0$  при  $z < 0$ ,  $\Theta(z) > 0$  при  $z > 0$ , причем области кристалла отвечают значения  $z > 0$ ;  $P_0 = (-\alpha/\beta)^{1/2}$  — спонтанная поляризация;

$\beta$  — коэффициент нелинейности;  $f(x) = \text{sgn } x$ . Для полидоменного сегнетоэлектрика с периодом доменной структуры  $d$

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-d}^{+d} \text{sgn } x \sin kx dx = \frac{2}{\pi k}, \quad k = \frac{(2n+1)\pi}{d}, \quad (3)$$

где  $k$  — волновой вектор вдоль оси  $x$ . Из (1)—(3) Фурье-образа поляризации  $P_k(z)$  получаем

$$P_k(z) = \frac{4\alpha P_0 \theta(z)}{\pi k (2\alpha + \kappa k^2)} - \frac{1}{(2\alpha + \kappa k^2)} \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad (4)$$

где соответствующее распределение потенциала  $\varphi_k(z)$  электрического поля зарядов поляризации определяется уравнением Пуассона

$$\Delta \varphi = 4\pi \text{div } P. \quad (5)$$

Решение для  $\varphi(z)$  из (5) должно отвечать граничным условиям на поверхности сегнетоэлектрика

$$\varphi(z)|_{z=+0} = \varphi(z)|_{z=-0}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=+0} - \frac{\partial \varphi}{\partial z} \Big|_{z=-0} = 4\pi P(x, 0). \quad (6)$$

Из (4)—(6) находим

$$\varphi_k(z) = -\frac{4\pi P_k(0) \sqrt{\epsilon}}{k(\sqrt{\epsilon} + 1)} \exp\left(-\frac{k}{\sqrt{\epsilon}} z\right), \quad (7)$$

где  $\epsilon = 1 + 4\pi/(2\alpha + \kappa k^2)$  — диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрика вдоль полярного направления. Тогда значение поляризации  $P_k(z)$  на поверхности кристалла  $z=0$  есть

$$P_k(0) = \frac{4\alpha P_0 (\sqrt{2\alpha + \kappa k^2 + 4\pi} + \sqrt{2\alpha + \kappa k^2})}{\pi k [(\sqrt{2\alpha + \kappa k^2 + 4\pi} + \sqrt{2\alpha + \kappa k^2})(\sqrt{2\alpha + \kappa k^2}) + 4\pi \sqrt{2\alpha + \kappa k^2}]}. \quad (8)$$

Для определения ширины  $\delta$  доменной границы вблизи поверхности сегнетоэлектрического кристалла определим значение  $P(x, 0)$  в середине домена и значение производной  $\partial P/\partial x$  в центре доменной стенки. С учетом (8) выражение для  $P(x, 0)$  приближенно есть

$$P(x, 0) = \frac{2\alpha P_0}{\pi^{3/2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin\left[\frac{\pi(2n+1)}{d} x\right]}{(2n+1) \sqrt{2\alpha + \kappa \frac{(2n+1)^2 \pi^2}{d^2}}}. \quad (9)$$

Отсюда значение поляризации в центре домена

$$P(d/2, 0) \approx P_0 (2\alpha/\pi^3)^{1/2}. \quad (10)$$

Аналогично получаем для  $\partial P/\partial x$  в центре доменной стенки

$$\frac{\partial P}{\partial x}(0, 0) = \frac{\alpha P_0}{(\pi^3 \kappa)^{1/2}} \ln(1 + \sqrt{2}). \quad (11)$$

Тогда ширина доменной стенки вблизи поверхности сегнетоэлектрика

$$\delta = \frac{P(d/2, 0)}{\partial P/\partial x(0, 0)} = \left(\frac{2\kappa}{\alpha}\right)^{1/2} \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (12)$$

Найденное значение  $\delta$  при более тщательном рассмотрении может незначительно ушириться за счет меньшей величины барьера в зависимости  $\Phi(P)$ , последовательно учитывающей нелинейные слагаемые.

Согласно (12), ширина доменной стенки и вблизи поверхности сегнетоэлектрика с учетом  $\ln(1 + \sqrt{2}) \sim 1$  остается практически такой же узкой, как и в объеме, и, следовательно, исследования кинетических явлений

с использованием модели узких доменных границ являются оправданными при температурах, достаточно удаленных от  $T_0$

$$(T_0 - T) > \frac{1}{a_0} \left( \frac{\alpha}{L^2} \right)^{1/2},$$

где  $L$  — толщина пластины [5].

#### Список литературы

- [1] Жирнов В. А. // ЖЭТФ. 1958. Т. 35. № 4. С. 1175—1180.
- [2] Даринский Б. М., Федосов В. Н. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 1. С. 22—27.
- [3] Федосов В. Н., Сидоркин А. С. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 8. С. 1322—1326.
- [4] Строкач А. А. // Укр. физ. журн. 1981. Т. 26. № 4. С. 656—659.
- [5] Ченский Е. В., Тарасенко В. В. // ЖЭТФ. 1982. № 3 (9). С. 1089—1099.

Воронежский государственный университет  
им. Ленинского комсомола  
Воронеж

Поступило в Редакцию  
8 февраля 1989 г.  
В окончательной редакции  
26 мая 1989 г.

УДК 548 : 537.611.43 : 539.124

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

## СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ ДВУХВАЛЕНТНОГО СЕРЕБРА В КРИСТАЛЛАХ $\text{BaF}_2$

М. М. Зарипов, В. А. Уланов, М. Л. Фалин

Исследование примесных ионов  $\text{Ag}^{2+}$  ( $4d^9$ ,  $^2D$ ) в кристаллах структурного типа флюорита  $\text{CdF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$  и  $\text{SrF}_2$  [1] обнаружило, что координационным многогранником внедренного иона является сжатый по оси  $C_3$  куб; причина искажения кубического окружения — эффект Яна—Теллера на основном орбитальном триплете иона  $\text{Ag}^{2+}$  ( $^2T_{2g}$ ). Сопоставление полученных в [1] экспериментальных фактов с результатами исследования кристаллов этого же структурного типа  $\text{SrCl}_2 : \text{Ag}^{2+}$  [2] показывает, что кажущаяся нечувствительность характера ян-теллеровского искажения комплексов серебра в  $\text{CdF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$  и  $\text{SrF}_2$  к изменению свойств кристалл-матрицы не является универсальной для всего структурного ряда, поскольку в кристалле  $\text{SrCl}_2 : \text{Ag}^{2+}$  ион серебра оказался смещенным из позиции замещенного им катиона  $\text{Sr}^{2+}$  вдоль оси [001]. Возникает вопрос о причинах столь резкого изменения состояния примесного иона при его внедрении в изоструктурные кристаллы: связано ли это с различием химических свойств лигандов  $\text{F}^-$  и  $\text{Cl}^-$  или является следствием значительного изменения отношения  $\eta$  суммы ионных радиусов [3] примесного иона и лиганда к расстоянию «катион—анион» соответствующего беспримесного кристалла? В связи с этим представляют интерес свойства комплексов серебра в кристаллах  $\text{BaF}_2$ , постоянная решетки которых удовлетворяет неравенству  $a(\text{SrF}_2) < a(\text{BaF}_2) < a(\text{SrCl}_2)$ .

Кристаллы для исследований выращены методом Бриджмена в атмосфере гелия со фтором. В процессе роста кристалла серебро внедряется в его решетку в состоянии  $\text{Ag}^+$ . Для перевода его в состояние  $\text{Ag}^{2+}$  необходимо рентгеновское облучение образцов ( $T \sim 300$  К), после чего в них возникают два типа парамагнитных центров (ПЦ) — ромбической и тетрагональной симметрий (соответственно ПЦ ( $D_{2h}$ ) и ПЦ ( $C_{4v}$ )). Оказалось, что в кристаллах, выращенных в атмосфере с большим содержанием фтора присутствуют в основном ПЦ ( $C_{4v}$ ). Уменьшение концентрации фтора приводит к заметному снижению общей концентрации центров серебра, главным образом за счет ПЦ ( $C_{4v}$ ).