

тальная зависимости  $\gamma$  от разности  $E_{02} - E_{03}$  хорошо согласуются между собой (рис. 2). Небольшое количественное расхождение может быть устранено, если предположить, что распределение  $P(E_g)$  имеет некоторые хвосты, составляющие  $\sim 10 \div 15\%$  от всего объема (рис. 2). Подчеркнем, что спектральная зависимость (2) была обнаружена и в многокомпонентных халькогенидных стеклах [1]. По-видимому, из-за сложного химического состава в этих материалах возникают значительные флуктуации  $E_g$ , что и приводит к кубической зависимости  $\alpha(\hbar\omega)$ .

Таким образом, в рамках предложенной модели можно объяснить аномальную спектральную зависимость коэффициента межзонного оптического поглощения в  $a\text{-Si}$  и  $a\text{-Si}:\text{H}$ . Модель позволяет получить количественное согласие с экспериментом и из анализа спектров оценить амплитуду флуктуаций ширины запрещенной зоны. Последняя зависит от условий приготовления образцов — максимальная величина  $\sim 0.3$  эВ наблюдается в свеженапыленной пленке  $a\text{-Si}$ , последующий отжиг ко-

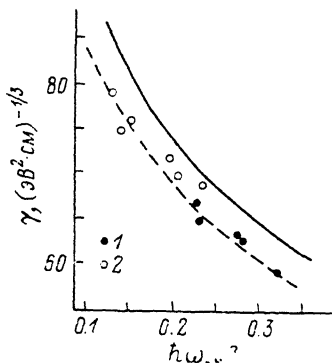


Рис. 2. Зависимость  $\gamma$  от разности  $E_{02} - E_{03}$  для образцов  $a\text{-Si}$  (1) и  $a\text{-Si}:\text{H}$  (2).

Сплошная линия — расчетная зависимость  $\gamma$ , штриховая — скорректированная расчетная зависимость  $\gamma$ .

торой приводит к понижению флуктуаций до  $\sim 0.2$  эВ; в свеженапыленной пленке  $a\text{-Si}:\text{H}$  наблюдается минимальная амплитуда флуктуаций  $\Delta E_g \approx 0.1$  эВ, которая возрастает при эффузии водорода.

#### Список литературы

- [1] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1982. Т. 1. 368 с.
- [2] Klazes R. H. e. a. // Phil. Mag. B. 1982. V. 45. N 4. P. 377—383.
- [3] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Ч. II / Под ред. Дж. Джоунупулоса и Дж. Люковски. М.: Мир, 1988. 447 с.
- [4] Cody G. D. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 20. P. 1480—1483.

Институт автоматизации и электрометрии  
СО АН СССР  
Новосибирск

Поступило в Редакцию  
27 сентября 1989 г.

## СПЕКТР ДИПОЛЬНО-АКТИВНЫХ ФОНОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$

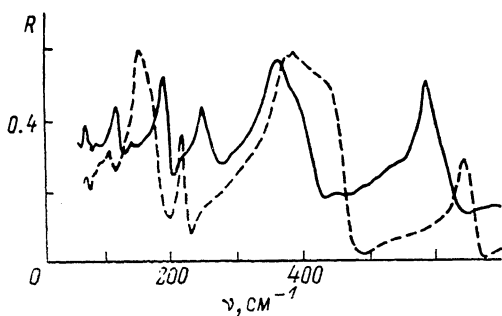
А. В. Баженов

Вопрос о полном спектре оптических фононов в иттрий-бариевом купрате (123) до настоящего времени остается дискуссионным. Это обусловлено тем, что измерение спектра дипольно-активных фононов методом ИК спектроскопии проводилось на керамиках либо порошках, что не позволяет провести корректные исследования поляризационных особенностей оптических спектров, дающих информацию о симметрии колебаний. Результаты таких экспериментальных исследований [1-6] и выполненных на основе их обобщения теоретических расчетов [1, 7] приведены в таблице. Имеется удовлетворительное согласие между результатами различных ав-

$$\Delta = (\nu_{LO}^2 - \nu_{TO}^2) \cdot 10^{-3}$$

Мола	Эксперимент		Теория		$\nu_{TO} (\nu_{LO})$	$\Delta$
	[ <sup>1</sup> , <sup>2</sup> ]	[ <sup>3-6</sup> ]	[ <sup>1</sup> ]	[ <sup>7</sup> ]	наст. раб.	
<b>КР-активные фононы</b>						
$A_{1g} : O_4$	475	479	484	491	—	—
$A_{1g} : O_2, 3$	456	455	401	349	—	—
$B_{1g} : O_2, 3$	343	341	352	335	—	—
$A_{1g} : \text{Cu}_2$	144	220	131	220	—	—
$A_{1g} : \text{Ba}$	110	141	121	135	—	—
$5E_g$	?	?	?	?	—	—
<b>Дипольно-активные фононы</b>						
$E_u : O_2, 3$	586	648	502 (507)	643	579 (629)	60
$E_u : O_2, 3$	247	593	276 (318)	546	355 (415)	46
$E_u : O_4$	354	?	355 (414)	400	248 (265)	9
$E_u : Y$	211	217	214 (243)	187	189 (198)	3.5
$E_u : \text{Cu}_1$	?	147	55 (62)	125	117 (117)	0
$E_u : \text{Ba}$	114	118	116	88	65 (72)	1
$A_{2u} : O_4$	?	593	540 (543)	606	635 (656)	27
$A_{2u} : O_2, 3$	?	360	390 (455)	371	366 (462)	80
$A_{2u} : Y$	188	190	189 (203)	181	211 (220)	3.9
$A_{2u} : \text{Ba} + O_4$	150	249	153 (163)	235	150 (181)	10
$A_{2u} : \text{Cu}_2$	114	108	116 (119)	73	108 (108)	0
$B_{2u} : O_2, 3$	—	—	257	331	—	—

торов по крайней мере для известной части спектра фононов, активных в комбинационном рассеянии (КР). Для дипольно-активных фононов наблюдаются значительные расхождения. Это объясняется возможностью исследовать кристаллы с малыми геометрическими размерами методом



КР в отличие от метода ИК спектроскопии. В последнее время выращены монокристаллы 123, размеры которых позволяют провести полный ком-

Рис. 1. Спектр отражения монокристалла  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  при 300 К в поляризациях  $E \perp C$  (сплошная кривая) и  $E \parallel C$  (штрихи).

Волновой вектор света  $q \perp C$ ,  $C$  — нормаль к купратным плоскостям.

плекс поляризационных измерений, необходимых для выяснения полного спектра дипольно-активных фононов методом ИК спектроскопии.

Исследовались монокристаллы 123 размером  $2 \times 3 \times 0.5$  мм, выращенные раствор-расплавным методом с использованием алундового тигля. Рентгеноспектральный анализ показал, что состав кристаллов отвечает формуле  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Al}_y\text{O}_{6+x}$ , где  $y=0.12$ . Кристаллы переходили в сверхпроводящее состояние при  $T_c=60$  К. Путем изохронных отжига в вакууме  $10^{-5}$  бар в течение 17 ч при 100, 200 и 300 °С были получены однородные диэлектрические монокристаллы с содержанием кислорода  $x=0$ . Содержание и распределение кислорода контролировались поляризационным оптическим микроскопом и по спектральному положению полносимметричного колебания мостикового кислорода в КР спектре. Измерялись спектры отражения поляризованного света при 300 К в спектральном диапазоне от 50 до 5500  $\text{см}^{-1}$  на Фурье-спектрометре. Из спектров рассчитывались энергии поперечных ( $TO$ ) и продольных ( $LO$ ) фононов с помощью преобра-

зований Крамерса—Кронига. Спектры регистрировались в геометрии, близкой к нормальному падению света в поляризациях  $E \parallel C$  и  $E \perp C$ , волновой вектор  $q \perp C$  ( $C$  — перпендикуляр к купратным плоскостям).

Установлено, что в спектральном диапазоне от 50 до 700  $\text{см}^{-1}$ , где расположены линии, определяемые оптическими фононами, спектр отражения  $q \parallel C$ ,  $E \perp C$  исследованных монокристаллов идентичен спектру монокристаллов 123, выращенных из платиновых тиглей. Таким образом, наличие Al в исследованных образцах не оказывает существенного влияния на спектр оптических фононов. На рис. 1 представлен полный спектр отражения  $E \perp C$  и  $E \parallel C$ , линии которого соответственно определяются колебаниями атомов вдоль и поперек купратной плоскости. Обнаружено 6 основных линий, определяемых модами симметрии  $E_u$  и 5 линий, определяемых модами  $A_{2u}$  (см. таблицу).

Теоретико-групповой анализ нормальных колебаний  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  свидетельствует о наличии 33 оптических мод. Из них 4 полносимметричные моды  $A_{1g}$ , одна  $B_{1g}$  и 5 двукратновырожденных мод симметрии  $E_g$ , активных

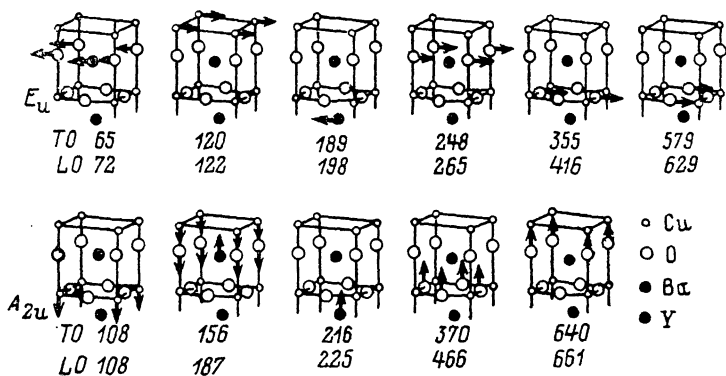


Рис. 2. Нормальные моды в тетрагональном  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  [7] и их отнесение в соответствии с таблицей.

в КР спектрах, в силу centrosymmetrichности кристалла не должны проявляться в ИК спектрах. Неактивна в ИК спектре и мода  $B_{2u}$ , определяемая противофазными колебаниями атомов кислорода O2, 3 вдоль оси C (используются обозначения работы [1]). В ИК спектре может проявиться 5 мод симметрии  $A_{2u}$  и 6 двукратновырожденных мод  $E_u$ . Именно такой набор линий обнаружен в настоящей работе. При рассмотрении связи данных линий с конкретной модой будем обозначать моду атомом, колебание которого в соответствии с [7] вносит доминирующий вклад в нормальное колебание, и принимать во внимание обычные соображения о соотношениях масс атомов, а также заряды атомов  $(Ze)_{k\alpha}$ , определяемые значениями TO-, LO-частот по [8]

$$\sum_j (v_{jLO}^2 - v_{jTO}^2)_\alpha = V^{-1} \sum_k N_k (Ze)_{k\alpha}^2 m_k^{-1}, \quad (4)$$

$V$  — объем элементарной ячейки;  $N_k$  — количество  $k$ -атомов массы  $m_k$  в ячейке,  $\alpha$  — направление поляризации.

На рис. 2 показано отнесение колебаний в соответствии с таблицей. Величина TO—LO расщепления в первую очередь определяется движением атомов кислорода (1). Установлено, что средний заряд кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  изотропен,  $Ze_{\parallel C} = Ze_{\perp C} = 1.0 e$  и  $(2.0 \pm 0.1) e$  соответственно без учета и с учетом поляризуемости внутренних оболочек, т. е.  $\epsilon_\infty = 4.0$ . В [1] было доказано заменой Y на другие редкоземельные элементы, что линии 189 (198) и 211 (220)  $\text{см}^{-1}$  определяются движением Y. Однако в [1, 7] они классифицированы по симметрии с точностью до наоборот. Не вызывает сомнений связь высокоэнергетических линий 579 (629) и 635 (656)  $\text{см}^{-1}$  с валентными колебаниями наиболее легких атомов O2, 3 и O4 соответственно. В [7] эти линии также классифицированы с точностью до

наоборот. Линию  $A_{2u}$ : 366 (462)  $\text{см}^{-1}$ , единственную между  $A_{2u}$ :  $\Upsilon$  и  $A_{2u}$ :  $O_4$ , естественно связать с деформационными колебаниями  $O_2, 3$  аналогично [1, 7]. Высокое значение  $TO-LO$  расщепления для этого колебания позволяет утверждать, что линия  $E_u$ : 355 (415)  $\text{см}^{-1}$  также определяется деформационными колебаниями  $O_2, 3$ . В таком случае оставшееся «кислородное» деформационное колебание  $O_4$  естественно связать с линией  $E_u$ : 248 (265)  $\text{см}^{-1}$ . Две низкоэнергетичные линии  $E_u$ : 120 (122) и  $A_{2u}$ : 108 (108)  $\text{см}^{-1}$ , характеризующиеся минимальным  $TO-LO$  расщеплением, видимо, соответствуют модам тяжелых атомов, а именно  $\text{Cu}1$  и  $\text{Cu}2$ . Тогда оставшиеся две линии  $E_u$ : 65 (72) и  $A_{2u}$ : 156 (187) необходимо связать с модами  $E_u$ :  $\text{Ba}+O_4$  и  $A_{2u}$ :  $\text{Ba}+O_4+\text{Cu}1$ .

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Thomsen C., Cardona M., Kress W. e. a. // Sol. St. Comm. 1988. V. 65. N 10. P. 1139—1144.
- [2] Gasparov L. V., Emel'chenko G. A., Kulakovskii V. D. e. a. // Opt. Soc. Am. B. 1989. V. 6. N 3. P. 440—447.
- [3] Kamaras K., Porter C. D., Dos M. G. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N8. P. 919—922.
- [4] Burns G., Dacol F. H., Freitas P. P. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 10. P. 5171—5173.
- [5] Macfarlane R. M., Rosen H. J., Engler E. M. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 1. P. 284—289.
- [6] Krol D. M., Stavola M., Weber W. e. a. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 16. P. 8325—8328.
- [7] Bates F. E. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 1. P. 322—327.

Институт физики твердого тела АН СССР  
Черноголовка  
Московская область

Поступило в Редакцию  
4 октября 1989 г.

УДК 548 : 537.621

© Физика твердого тела, том 32, № 5, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, № 5, 1990

## СОСТОЯНИЕ КЛАСТЕРНОГО СПИНОВОГО СТЕКЛА В СПЛАВЕ $\text{Co}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}$ : ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ НАМАГНИЧЕННОСТИ

*Н. А. Белоус, И. А. Зорин, Н. В. Кулич,  
И. В. Лежненко, А. И. Товстолыткин*

Кобальт-галлиевые сплавы  $\text{Co}_x\text{Ga}_{1-x}$ , имеющие в области концентраций  $0.35 < x < 0.75$  структуру В2 ( $\text{CsCl}$ ), в последнее время подвергались широкому изучению [1-4]. Авторы указанных работ связывают магнитные свойства этих сплавов с антиструктурными атомами  $\text{Co}$ , возникающими как при отличии состава от стехиометрического ( $\text{Co}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}$ ), так и при определенной термической предистории. Согласно измерениям малоуглового нейтронного рассеяния, динамической восприимчивости и ЯМР, при концентрациях  $0.50 \leq x \leq 0.56$  магнитное поведение сплавов соответствует кластерным спиновым стеклам [2-4].

Целью данной работы являлось изучение квазистатических магнитных свойств главным образом в парамагнитной области, кластерного спинового стекла на примере сплава  $\text{Co}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}$ . Поликристаллические образцы указанного состава были получены выплавкой в дуговой печи с закалкой выливанием в тигель и последующим отжигом при 850 °С в течение 24 ч. Измерения намагниченности производились при помощи СКВИД-магнитометра в магнитном поле до 125 Э и температурном интервале 4.2—60 К.