

картина соответствует стыкующиванию кристаллофизической оси X с осью Y в кристалле LiNbO_3 .

Таким образом, в настоящей работе был изучен фотоупругий эффект в ниобате лития, а также экспериментально исследовано и объяснено распределение оптических индикатрис при кручении кристаллов LiNbO_3 .

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Нарасимхамурти Т. С. Фотоупругие и электрооптические свойства кристаллов. М.: Мир, 1984. 624 с.
- [2] Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975. 680 с.

Физико-механический институт
им. Т. В. Карпенко АН УССР

Поступило в Редакцию
22 февраля 1991 г.

Львов

Львовский государственный университет
им. И. Франко

УДК 539.2 : 548

© Физика твердого тела, том 33, № 8, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 8, 1991

ИСКАЖЕНИЯ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ КИСЛОРОДНЫМИ ВАКАНСИЯМИ

В. Г. Мазуренко, В. С. Кортюв

Переход в кристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ от орторомбической ($x=7$) структуры к тетрагональной ($x=6$) связан с освобождением ионами кислорода позиций (e) и их частичным перераспределением по позициям (v). Обозначение позиций приняты в соответствии с пространственной группой D_{2h}^1 [1]. При этом возможно появление следующих дефектов: одиночные вакансии, дивакансии ионов кислорода в цепочках $\dots\text{O}(4)-\text{Cu}(1)-\text{O}(4)$, комплекс-вакансия и междоузельный ион кислорода в ранее свободной позиции (v). Такие структурные изменения приводят к искажениям фононных спектров кристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, проявляющимся в возникновении дополнительных колебательных мод в спектрах ИК и КР [2, 3].

Целью настоящей работы явилось изучение возмущающего воздействия описанных выше дефектов на фононные спектры кристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

Для моделирования динамики решетки идеальных и дефектных кристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ использовали модель жестких ионов. Параметры модели, а также рассчитанные на их основе частоты длинноволновых оптических фононов в центре зоны Бриллюэна приведены в работе [4]. Локальные плотности состояний (ЛПС) фононов в идеальном и дефектном кристаллах рассчитывали рекурсивным методом. Методика расчетов описана в работе [4]. С целью дополнительной проверки корректности используемых параметров нами рассчитана парциальная плотность фононных состояний (ППС) атомов меди в кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (рис. 1). На этом рисунке приведена также экспериментально определенная парциальная плотность колебательных состояний атомов меди [5]. Видно, что хорошо описываются положение основного пика в ППС, а также граничная частота колебаний атомов меди. Хуже согласуется спектр выше 6 ТГц. Удовлетворительное согласие рассчитанной и экспериментальной ППС подтверждает корректность настоящего подхода. Все описанные выше дефекты в кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ реализуются в медь-кислородных цепочках $\dots\text{O}(4)-\text{Cu}(1)-\text{O}(4)\dots$. Это обуславливает выбор атома меди $\text{Cu}(1)$ в качестве «зонда», фиксирующего искажения фононных спектров кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. В этой связи сначала рассчитывали ЛПС фононов

в позиции атома Cu(1) для направлений x, y, z в идеальном ρ_0 , а затем дефектным ρ кристаллах. Максимумы в приращении ЛПС $\Delta\rho = \rho - \rho_0$, не совпадающие с максимумами ρ_0 , интерпретировались нами как квазилокальные колебания, индуцируемые дефектами. При моделировании дефектных кристаллов учитывали различное зарядовое состояние вакансий (с положительным или отрицательным зарядом). Первый случай соответствует вакансии в позиции иона кислорода O(4), а второй — вакансии, захватившей электрон. Зарядовое состояние вакансий учитывали через кулоновскую часть динамической матрицы.

На рис. 2 представлены ЛПС в позиции атома Cu(1) в направлении x в идеальном кристалле, а также приращения ЛПС при наличии вакансий с положительным или отрицательным зарядом. Положительно заряженная

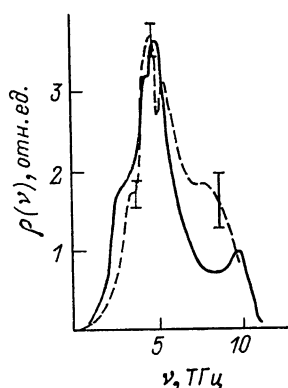


Рис. 1. ЛПС атомов меди в кристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

Сплошная линия — расчет, штриховая — эксперимент [1].

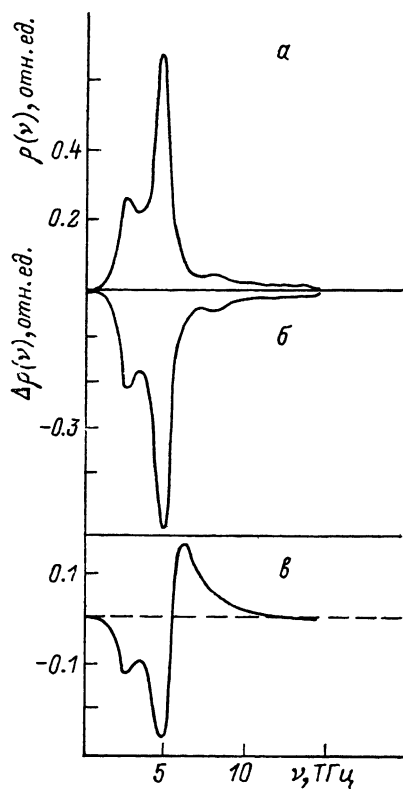


Рис. 2. ЛПС в позиции атома Cu(1) в направлении x в кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

a — идеальный кристалл, b — $\Delta\rho$ при наличии положительно заряженной вакансии, c — $\Delta\rho$ при наличии отрицательно заряженной вакансии ионов кислорода O(4) или дивакансии.

вакансия не приводит к появлению дополнительных колебательных мод. В случае же отрицательно заряженной вакансии индуцируется резонансное колебание с частотой ~ 6.3 ТГц. Результаты расчетов для различных направлений и типов дефектов сведены в таблицу. Анализ таблицы показывает, что значения частот резонансных колебаний существенно зависят от направления и зарядового состояния дефекта. Для отрица-

Частоты квазилокальных колебаний, индуцируемые дефектами в кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Направление	Частота квазилокальных колебаний, ТГц				междуузельный ион кислорода и вакансия
	одиночная вакансия		дивакансия		
	полож. заряд.	отриц. заряд.	полож. заряд.	отриц. заряд.	
x	—	6.3	—	6.3	1.3
y	—	—	9.07	—	8.03
z	—	7.9	5.5	7.9	5.8

тельно заряженной вакансии и дивакансии искажения фононного спектра кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ совпадают. Все квазилокальные колебания анизотропны. Это позволяет осуществить экспериментальную проверку полученных данных. В работе [2] в спектрах КР монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ при $6.61 \leq x \leq 6.79$ обнаружена дополнительная полоса около 6.9 ТГц, имеющая аномальную температурную зависимость. Кроме того, аналогичная полоса в спектре КР наблюдалась в геометрии (xx) [3]. В спектрах ИК нестехиометрических образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ зарегистрирована дополнительная полоса на частоте ~ 6.6 ТГц [3].

Все рассчитанные нами частоты квазилокальных колебаний в оптической части спектра группируются в области от 5.5 до 9.1 ТГц. Учитывая что в спектрах КР дополнительная мода на частоте 6.9 ТГц наблюдается в геометрии (xx) , можно сделать вывод о связи этого колебания с одиночными вакансиями и дивакансиями с локализацией на них части электронной плотности. Расхождение результатов расчетов с экспериментом обусловлено приближениями модели жестких ионов, а также пренебрежением релаксацией решетки.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] International Tables for X-Ray Crystallography. V. 1. Birmingham, Kynock Press, 1952. P. 558.
- [2] Поносов Ю. С., Болотин Г. А., Гурин О. В., Чеботаев Н. М., Самохвалов А. А., Наумов С. В. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. № 7. С. 380—383.
- [3] Feile R. // Physica C. 1989. V. 159. N 1. P. 1—32.
- [4] Мазуренко В. Г., Кортов В. С. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С. 3034—3037.
- [5] Паршин П. П., Землянов М. Г., Парфенов О. Е., Чернышев А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. № 7. С. 380—382.

Уральский политехнический институт
им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
25 февраля 1991 г.

УДК 539.219.3

© Физика твердого тела, том 33, № 8, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 8, 1991

ВОЛНА ДЕФОРМАЦИИ СДВИГА ПРИ ДИФФУЗИОННОМ ПЕРЕМЕЩЕНИИ АТОМА ПО РЕШЕТКЕ

В. В. Мещеряков

В недавних работах [1, 2] вновь обсуждаются вопросы о роли упругих деформаций решетки при диффузии атомов и, как следствие, о сдвиговой неустойчивости реальных кристаллов при высоких температурах. В связи с этим возникает необходимость решения динамической задачи о возмущении решетки единичным диффузионным пробегом атома.

Возмущением в этой задаче является плотность силы $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$, действующей на решетку со стороны диффундирующего атома. Полагая, что характерная область движения атома $r(t) \ll r$ — расстояния до точки наблюдения, представим $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ мультипольным разложением

$$F_i(\mathbf{r}, t) = f_i(t) \delta(\mathbf{r}) - P_{in}(t) \partial_n \delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Монопольная и дипольная составляющие (1) определяются силой $\mathbf{f}(t) = m \ddot{\mathbf{r}}(t)$, где m — масса атома, и силовой диадой $\mathbf{P}(t) = [\mathbf{f}_0 + \mathbf{f}(t)] \times [\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}(t)]$. Постоянные векторы \mathbf{f}_0 и \mathbf{r}_0 характеризуют начальное состояние решетки ($\mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}_0 = 0$) и определяют тензор статических силовых диполей