

УДК 537.311

## КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА НА МЯГКОЙ МОДЕ В СОЕДИНЕНИИ $\text{TlInS}_2$

*В. М. Бурлаков, Е. А. Виноградов, Н. М. Гасанлы,  
Н. Н. Мельник, А. П. Рябов, М. Р. Яхьеев*

Изучены низкочастотные спектры КРС в окрестности сегнетоэлектрического фазового перехода. Из температурной зависимости параметров спектра (частоты, полуширины и интенсивности линий) при помощи модельного расчета определены параметры мягкой моды. Установлено, что частота мягкой моды имеет корневую зависимость от  $T_c - T$ .

Интерес к кристаллам  $\text{TlGaSe}_2$  и их структурному аналогу  $\text{TlInS}_2$  во многом обусловлен наличием в них последовательности структурных фазовых переходов, один из которых является переходом в несоизмерную фазу, а другой — в сегнетоэлектрическую (в  $\text{TlInS}_2$  соответственно  $T_i \approx 220$  К и  $T_c \approx 200$  К) [1]. Механизмы этих переходов пока не ясны. В [2] высказано предположение, что сегнетоэлектрический фазовый переход является несобственным. Наряду с этим статическая диэлектрическая проницаемость удовлетворяет закону Кюри—Вейсса в окрестности  $T_c$ . В [3] была обнаружена сегнетоэлектрическая мягкая мода, частота которой в парафазе пропорциональна  $\sqrt{T_c - T}$ , что характерно для собственного сегнетоэлектрика. В сегнетофазе частота мягкой моды резко возрастает, поэтому детально ее температурную зависимость исследовать не удалось.

Задачей настоящей работы было определение температурной зависимости параметров мягкой моды в сегнетофазе. Это важно для выяснения природы и механизма фазовых переходов в  $\text{TlInS}_2$ .

Спектры КРС возбуждались аргоно-криптоновым лазером ИЛМ с линией  $\lambda = 647.1$  нм в  $90^\circ$ -й геометрии рассеяния и регистрировались на двойном монохроматоре ДФС-24 с разрешением  $1 \text{ см}^{-1}$ . Образцы, выращенные по методу Бриджмена, помещались в гелиевый криостат с прокачкой паров гелия (температура 20—300 К, точность стабилизации 0.05 К).

На рис. 1 представлен фрагмент низкочастотного спектра при различных температурах. На рис. 2 представлены экспериментальные значения параметров линий (частота, полуширина, интегральная интенсивность) спектра, полученные разложением спектра на составляющие контуры [4]. Температурное поведение частот линий (особенно № 1 и № 4) можно объяснить присутствием в спектре мягкой моды, взаимодействующей с рядом жестких колебаний. В проведенном модельном расчете мы ограничились колебаниями 1 и 4, все параметры которых описывались в рамках модели двух взаимодействующих гармонических осцилляторов с затуханием, один из которых соответствует мягкой моде  $\omega_M = A(T_c - T)^{1/2} + c$ ,<sup>1</sup> а другой — жесткой моде с  $\omega = \omega_0$ . При этом было учтено, что при стремлении  $T \rightarrow T_c - 0$  происходит сильное возрастание затухания мягкой моды (рис. 2, б, кривая 4) и уменьшение ее интегральной интенсивности практически до

<sup>1</sup> Константа  $c$  введена в связи с тем, что в выбранной геометрии рассеяния регистрируются, строго говоря, продольно-поперечные возбуждения (квазифононы), вследствие чего частота мягкого квазифона не обращается в нуль при  $T = T_c$ .

нуля (рис. 2, в). В связи с этим в модель были заложены зависимости  $\gamma_M = \gamma_{M0} + \gamma_{M1} \frac{T_c}{T_c - T}$  [5],  $I_M = I_{M0} \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right) (n + 1)$ , 
$$n = \left( e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^{-1}. \quad (1)$$

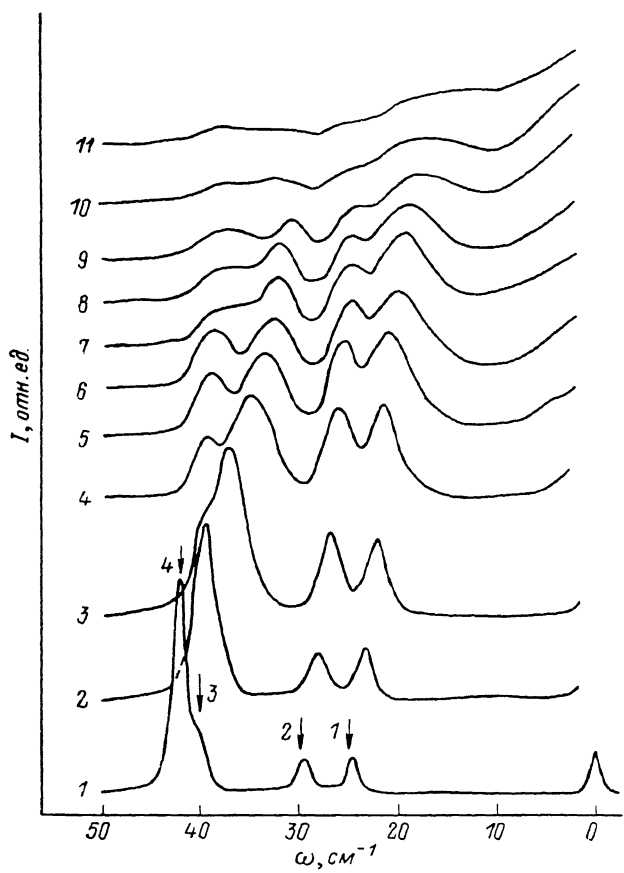


Рис. 1. Фрагменты низкочастотного спектра RPS TlInS<sub>2</sub> в поляризации Z (XX) Y при различных температурах.

T, К: 1 — 22, 2 — 70, 3 — 100, 4 — 136, 5 — 154, 6 — 162, 7 — 172, 8 — 178, 9 — 185, 10 — 190, 11 — 205. Стрелки показывают положение максимумов линий, полученных при разложении спектра на составляющие контуры.

Расчет проводился по формуле

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{I_0 G_M^{-1} + I_M G_0^{-1} - 2i \sqrt{I_M I_0}}{G_M^{-1} G_0^{-1} - \lambda^2} \right\}, \quad (2)$$

где  $G_M$  и  $G_0$  — функция Грина мягкого и жесткого фононов соответственно;  $G_i^{-1} = \omega_i - \omega + i\gamma_i$ ;  $\lambda$  — константа взаимодействия. Сопоставление расчета с экспериментом приведено на рис. 3. Оптимальными параметрами модели оказались следующие:  $\gamma_0 = 0.7 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_M = (14 + 1.85 \sqrt{T_c - T}) \text{ см}^{-1}$ ,  $T_c = 205 \text{ К}$ ,  $\gamma_M = \left( 0.1 + \frac{T_c}{T_c - T} \right) \text{ см}^{-1}$ ,  $\lambda = -6 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 26 \text{ см}^{-1}$ . Из рис. 3 видно, что совпадение расчетных зависимостей с экспериментальными является вполне удовлетворительным, несмотря на то что в расчетах не учтена мода 2. По-видимому, эта мода слабо влияет на взаимодействие мод 1 и 4. Это также видно из рис. 2, в, на котором представлена интенсивность моды 2 в сравнении с теоретической кривой (2') в отсутствие взаимодействия.

Таким образом, мягкая мода в  $\text{TlInS}_2$  имеет корневую зависимость от  $(T_c - T)$  в широком интервале температур  $30 \leq T \leq 200$  К (что соответствует теории Ландау фазовых переходов 2-го рода). При приближении к точке фазового перехода происходит возрастание полуширины и уменьшение интегральной интенсивности мягкой моды по законам (1). Причиной

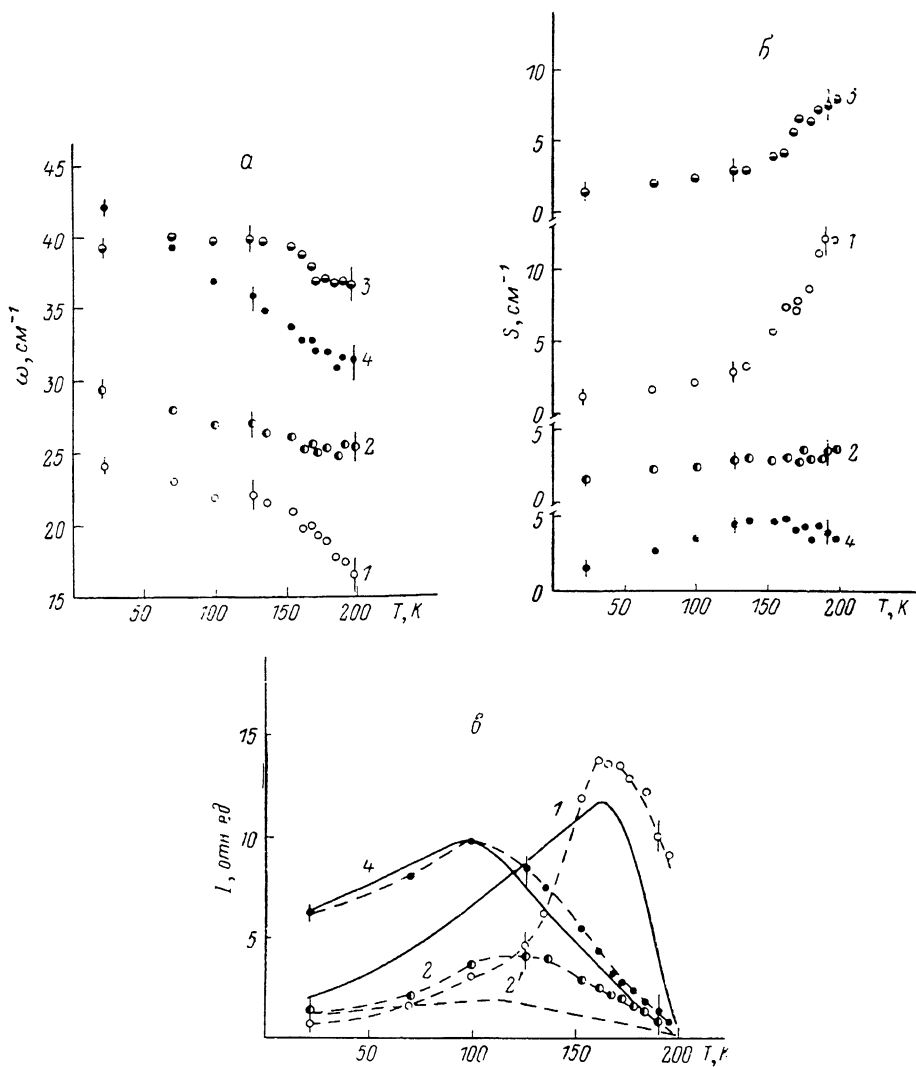


Рис. 2. Температурные зависимости частот (а), полуширин (б) и интегральных интенсивностей (в) линий в спектре КРС в поляризации  $Z$  ( $XX$ )  $Y$  (номера кривых соответствуют номерам линий на рис. 1).

Сплошные кривые — расчет в модели двух связанных гармонических осцилляторов с затуханием (линии 1 и 4). Кривая 2' — теоретическая зависимость  $I$  (2) в отсутствие какого-либо взаимодействия. Интенсивность линии 3 не приводится, поскольку эта линия принадлежит поляризации  $Z$  ( $XY$ )  $Y$ .

уменьшения интенсивности мягкой моды является, по-видимому, плавное уменьшение параметра порядка, так как

$$I \sim \eta_0^2 (\delta\eta)^2. \quad (3)$$

Заметим, что  $\delta\eta$  в (3) представляет собой флуктуацию координаты наблюдаемого квазифонана и не может сильно возрастать вблизи  $T_c$  по указанным выше причинам.

Увеличение затухания мягкой моды может быть связано как с частотной зависимостью затухания (мягкая мода входит в область высокой плот-

ности состояний спектра акустических фононов), так и с возрастанием флуктуаций фазы параметра порядка при переходе в несоизмерную фазу [6]. Для более определенного ответа на этот вопрос необходимо исследовать угловую зависимость затухания квазифона. Если затухание не зависит от угла и определяется только температурой, то оно обусловлено фазовыми флуктуациями.

Из совокупности полученных результатов следует вывод, что обнаруженная нами по спектрам КРС мягкая мода является сегнетоэлектрической (с поправкой на ориентацию волнового вектора), идентичной наблюдавшейся в субмиллиметровых диэлектрических спектрах [3], а сегнетоэлектрический фазовый переход в  $TlInS_2$  является, по-видимому, собственным.

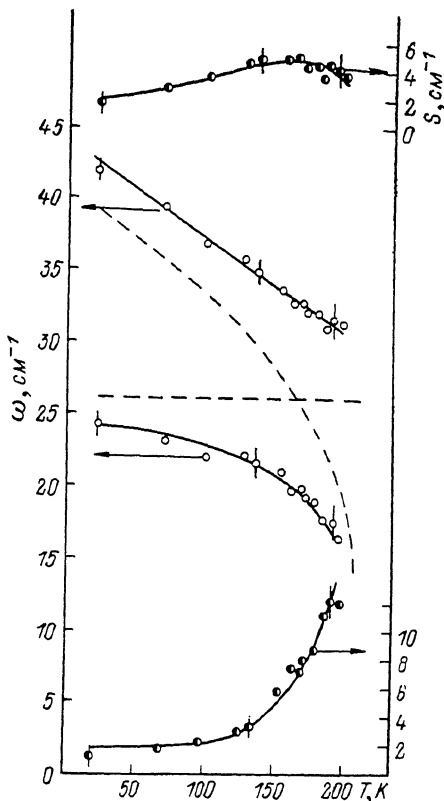


Рис. 3. Сравнение модельного расчета с экспериментальными результатами.

Темные и светлые кружки — экспериментальные значения полуширин и частот линий КРС соответственно. Сплошные кривые — расчет в рамках модели двух связанных затухающих гармонических осцилляторов. Штрихи — затравочные частоты модельных осцилляторов.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Вахрушев С. Б., Жданова В. В., Квятковский Б. Е., Окунева Н. М., Аллавердиев К. Р., Алиев Р. А., Сардарлы Р. М. Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 6, с. 245—247.
- [2] Алиев Р. А., Аллавердиев К. Р., Баранов А. И., Иванов Н. Р., Сардарлы Р. М. ФТТ, 1984, т. 26, № 5, с. 1271—1276.
- [3] Волков А. А., Гончаров Ю. Г., Козлов Г. В., Аллавердиев К. Р., Сардарлы Р. М. ФТТ, 1983, т. 25, № 12, с. 3583—3585.
- [4] Кучеров А. П. ЖПС, 1984, т. 41, № 1, с. 79—82.
- [5] Леванюк А. П., Щедрина Н. В. ФТТ, 1974, т. 16, № 5, с. 1439—1443.
- [6] Струков Б. А., Леванюк А. П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука, 1983. 240 с.

Институт спектроскопии АН СССР  
Троицк  
Московская область

Поступило в Редакцию  
9 марта 1987 г.  
В окончательной редакции  
1 февраля 1988 г.