

работах. В слоистых кристаллах, если время испытания не превышало 20 мин, ПЛС развивались строго в определенных местах, а именно в центральной части нелегированных слоев, занимая $\sim 1/3$ их ширины. На рис. 3 показано чередование по образцу зон, занятых волнистыми ступенями сдвигов и соответствующих выходу ПЛС на винтовую грань (010). При более длительных испытаниях избирательность в расположении ПЛС исчезает и картина их распределения соответствует однородным кристаллам.

Таким образом, результаты высокотемпературных испытаний слоистых монокристаллов со слоями, ориентированными вдоль плоскости скольжения, показали, что, как и при комнатной температуре, пластическая деформация протекает в нелегированных («чистых») слоях. Однако, поскольку при этих температурах различие в величинах предела текучести чистых и примесных кристаллов практически отсутствует, в данном случае объяснить выбор места, где развивается пластическая деформация, этим различием, как и при комнатной температуре, нельзя и нужно искать другую причину. Обращает на себя внимание тот факт, что при высокой температуре пластическое течение происходит только в центральной части нелегированного слоя, соответствующей наиболее широкому участку дислокационной зоны вокруг царапины, в то время как при комнатной температуре деформация протекает во всем нелегированном слое, приводя к равномерному заполнению его полосами скольжения. Плавное изменение ширины дислокационной зоны в мягких нелегированных участках (рис. 2) свидетельствует о плавном изменении примесного состава в «чистом» слое. Это дает основание сделать вывод, что высокотемпературная локализация пластической деформации чувствительна к неоднородности в распределении примеси, что представляется очень важным для понимания механизма высокотемпературного деформирования.

Л и т е р а т у р а

- [1] Никифоров А. В., Носов Ю. Г., Клявин О. В., Антонов П. И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 485—490.
- [2] Никифоров А. В., Носов Ю. Г., Мухамеджанова М. Б., Клявин О. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 12. С. 3611—3613.
- [3] Антонов П. И., Носов Ю. Г., Никаноров С. П. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1985. Т. 49. № 12. С. 2295—2297.
- [4] Бережкова Г. В., Скворцова Н. П., Перстнев П. П., Регель В. Р. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 4. С. 1074—1079.
- [5] Бережкова Г. В., Скворцова Н. П., Регель В. Р., Перстнев П. П. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1986. Т. 50. № 3. С. 496—500.
- [6] Scvortzova N. P., Berezhkova G. V. // Cryst. Res. Technol. 1986. V. 21. N 7. P. 939—949.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
22 августа 1988 г.

УДК 536.421.1

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ВЛИЯНИЕ ВТОРИЧНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА НА ЭПР СПЕКТР ЦЕНТРА $\text{Cr}^{3+}-\text{V}(\text{K}^+)$ В KCdF_3

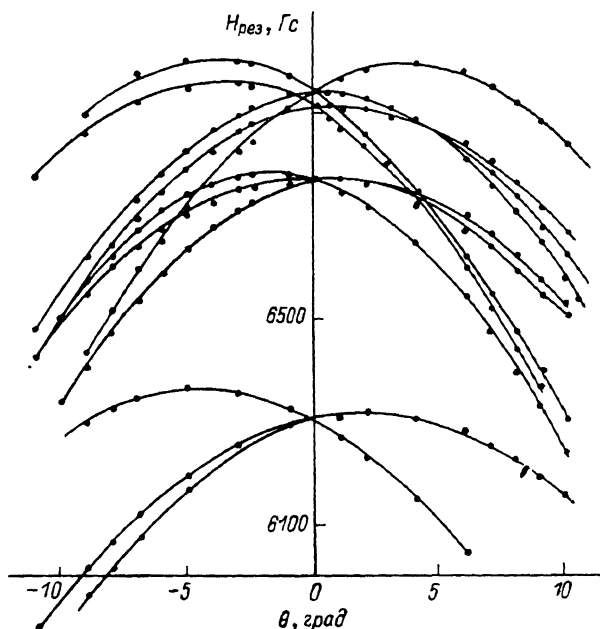
М. В. Черницкий, В. А. Важенин, А. Е. Никифоров, Р. Ю. Абдулсабиров

1. Сегнетоэластик KCdF_3 претерпевает каскад дисторсионных фазовых переходов при температурах $T_{c1}=485$ и $T_{c2}=471$ К, связанных с конденсацией ротационных мягких мод $R_{25}(\varphi_1\varphi_2\varphi_3)$ и $M_3(\psi_1\psi_2\psi_3)$ с волновыми векторами в R и M точках зоны Бриллюэна соответственно

(обозначения [1]). Имеется несколько интерпретаций структурных искажений в этом материале. Причем выводы, полученные из экспериментов по ЭПР [2, 3], не согласуются с данными по рассеянию рентгеновских лучей [4, 5]. В работе [5], опубликованной последней, предполагалась следующая последовательность искажений:

$$O_h^1 \xrightarrow{(0\varphi\psi)} D_{2h}^{17} \xrightarrow{(\varphi\varphi\psi)} D_{2h}^{18}. \quad (1)$$

Особенностью первого фазового перехода является одновременная конденсация различных мягких мод M_3 и R_{25} . В этом случае в разложении свободной энергии по параметру порядка (ПП) возможен отличный



Угловая зависимость резонансного поля примесного центра Cr^{3+} — вакансия K^+ на оси $\langle 111 \rangle$, $T = 300$ К.

от нуля член $P \sum_{i \neq j} X_j^{(i)} M_j R_i$ [6], где $X_j^{(i)}$ — компоненты вторичного параметра порядка, преобразующиеся по неприводимому представлению X_5' пространственной группы O_h^1 . В KCaF_3 такому вторичному ПП отвечает нормальное колебание фторовой подрешетки с волновым вектором в X точке зоны Бриллюэна. Конденсация сопутствующей $X_j^{(i)}$ не влечет добавочного понижения симметрии. Второй сопутствующей модой в сегнетоэлектрике KCaF_3 является однородная деформация (d).

2. Нами исследовался ЭПР спектр $\text{KCaC}_3 : \text{Cr}^{3+}$. Полученные результаты подтверждают последовательность искажений (1) из [5]. Температурное поведение спектра ЭПР и угловые зависимости исследовались при магнитном поле H вблизи $\langle 111 \rangle$ оси кристалла. Спектр удалось интерпретировать благодаря предварительно проведенному симметричному анализу. Поведение спектра ЭПР при H вблизи $\langle 111 \rangle$ (см. рисунок) определяется зависимостью от ПП констант спинового гамильтониана c_{21} , b_{21} , c_{22} (используется система координат, связанная с кубическими осями KCaF_3). Вклад констант b_{20} и b_{22} редуцируется фактором $(3 \cos^2 \theta - 1)$, где $\theta \approx 54.7^\circ$. Зависимость c_{21} , b_{21} , c_{22} от ПП получается с помощью способа, изложенного в [7, 8]

$$\begin{aligned} c_{21} = & A^R (\varphi_y - \varphi_x) + A^M (\psi_y - \psi_x) + B_1 (\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2 + \psi_x^2 + \psi_y^2 + \psi_z^2) + \\ & + B_3^C (\psi_y \varphi_x + \psi_x \varphi_y) + B_2 (2\varphi_x^2 + 2\varphi_y^2 - \varphi_z^2 - \varphi_x^2 - \varphi_y^2 - \varphi_z^2) + \\ & + B_3^R \varphi_y \varphi_x + B_4^C (\psi_x (\varphi_y + \varphi_z) + \varphi_x (\psi_y + \psi_x)) + B_4^R \varphi_x (\varphi_y + \varphi_z), \end{aligned} \quad (2)$$

где A_i^{III} , B_i^{III} — некоторые феноменологические константы. Для b_{21} и c_{22} получаются аналогичные выражения с помощью циклических перестановок индексов x, y, z . Зануляя в (2) соответствующие φ_i и ψ_i , задавая знаки компонент III, можно получить спин-гамильтонианы всех парамагнитных центров в произвольном домене фазы ($\psi\varphi\varphi$). Величины некоторых феноменологических констант и их линейных комбинаций можно оценить из значений $dH_{\text{рез}}/d\theta$ 12 резонансных линий рисунка при $\theta=0^\circ$ (учитывались первый и второй порядки теории возмущений) — см. таблицу. Ве-

Величины феноменологических констант (МГц)

	ПП	ПП + X	Эксперимент
$A^{\text{III}}\psi_i$	-35j.	-356.	-32j. \pm 8.
$A^{\text{R}}\varphi_i$	-362.	-362.	-324. \pm 8.
$B_1\varphi_i^2$	77.	77.	63. \pm 15.
$B_2\varphi_i^2$	174.	141.	160. \pm 40.
$B_3^C\varphi_i\psi_j$	-268.	368.	483. \pm 15.
$B_4^C\varphi_i\psi_j$	-83.	-99.	-68. \pm 15.
$B_3^R\varphi_i\varphi_j$	-231.	-233.	-241. \pm 15.
$B_4^R\varphi_i\varphi_j$	-83.	-85.	-83. \pm 15.

Примечание. Для расчета брались структурные данные [°], $T = 300$ К, $|\varphi| = |\psi| = 6^\circ$.

Величины констант были также рассчитаны в рамках микроскопической модели, использующей полуэмпирические ян-теллеровские константы для терма 4T_2 иона Cr^{3+} . Ян-теллеровские константы смешанного типа считались в модели точечных зарядов. В таблице приведены величины констант, полученные при учете искажений, отвечающих только III (R_{25} и M_3 моды), и результаты учета сопутствующих $X^{(i)}$ моды и однородной деформации.

3. Наблюдение на эксперименте разных знаков у констант B_3^{II} и B_3^{I} , стоящих в (2) при эквивалентных комбинациях из компонент ротационных мод $\varphi_i\varphi_j$ и $\varphi_i\psi_j$ ($i \neq j$), может быть объяснено только при учете взаимодействия $\text{Cr}^{3+}-V(\text{K}^+)$ с $X^{(i)}$ модой. Большая положительная величина B_3^{I} при этом получается в рамках нескольких рассмотренных нами микроскопических моделей примесного центра $\text{Cr}^{3+}-V(\text{K}^+)$ (учитываются смещение иона Cr^{3+} и деформация октаэдра CrF_6 вдоль тригональной оси). Наблюдение нами такой величины на эксперименте является еще одним косвенным подтверждением предположения автора [5] об одновременной конденсации M_3 и R_{25} мягких мод.

4. Константы A^{II} и A^{I} слабо различаются за счет небольшой величины кулоновского взаимодействия примесного центра с дальними сферами окружения. Тогда с точностью 0.014 можно оценить величину

$$\delta_{\text{ЭПР}} = \frac{A^{\text{II}}\psi | - | A^{\text{I}}\varphi |}{| A^{\text{II}}\psi | + | A^{\text{I}}\varphi |} = \frac{|\psi| - |\varphi|}{|\psi| + |\varphi|} \approx 0.051, \quad (3)$$

$\delta_{\text{ЭПР}}$ на порядок меньше величины, полученной из данных по рассеянию рентгеновских лучей $\delta = 0.206$ [6]. Этот факт можно объяснить влиянием примесного центра на локальное распределение III. Различные аспекты роли дефекта при структурных фазовых переходах были рассмотрены в [9]. В частности, вводилось понятие «ядра» дефекта — пространственной области, в которой величина III определяется только характеристиками дефекта. Нами определено такое перераспределение III в первой сфере окружения парамагнитного поля, при котором $|\varphi_{\text{ок}}| = |\psi_{\text{лок}}|$.

- [1] Александров К. С., Анистратов А. Т., Безноспков Б. В., Федосеева Н. В. Фазовые переходы в кристаллах галогидных соединений АВХ₃. Новосибирск, 1981. 266 с.
 [2] Arakawa M., Ebisu H. // J. Phys. Soc. Jap. 1979. V. 46. N 5. P. 1571—1579.
 [3] Arakawa M., Ebisu H. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 51. N 1. P. 191—198.
 [4] Hidaka M., Hosogy S. // J. Physique. 1982. V. 43. N 8. P. 1227—1232.
 [5] Darlington C. N. W. // J. Phys. C. 1984. V. 17. N 16. P. 2859—2863.
 [6] Darlington C. N. W. // Phys. St. Sol. b. 1976. V. 76. N 1. P. 231—239.
 [7] Нпкифоров А. Е., Кроткий А. И., Попков С. В., Черняцкий М. В. // Деп. в ВИНТИ 19.05.83, № 4962-83.
 [8] Нпкифоров А. Е., Кроткий А. И. // ФТТ. 1984. Т. 26. С. 2479—2481.
 [9] Леванюк А. П., Осипов В. В., Сигов А. С., Собынин А. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 1. С. 345—368.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило в Редакцию
30 марта 1988 г.
В окончательной редакции
29 августа 1988 г.

УДК 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ШИРИНА ЛИНИИ ДЭЯР, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ТВЕРДЫХ ПАРАМАГНЕТИКАХ

Г. Л. Бушвили, Н. П. Фокина

Несмотря на то что исследованию веществ методом двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) посвящено большое число работ [1-5], остается невыясненным вопрос о ширине ДЭЯР в случае, когда она обусловлена электронным диполь-дипольным (*dd*) взаимодействием. В [1] приведены выражения (4.18, 4.19, 4.38а) для вероятности W_n ядерного перехода с учетом усиления радиочастотного (РЧ) поля, обусловленного сверхтонким взаимодействием (СТВ), причем указывается, что W_n пропорциональна функции формы электронного спинового пакета. Однако такое утверждение с первого взгляда непонятно, так как в гамильтониане (4.18) остаются только ядерные спины, находящиеся под действием усиленного электронами РЧ поля. Данная работа посвящена выяснению этого вопроса.

Для упрощения задачи рассмотрим модельную систему — совокупность пар электрон + близкое (или собственное) ядро со спинами 1/2 в постоянном магнитном поле H_0 || z (z — главная ось парамагнитного центра (ПЦ)), связанных СТВ с константой A_n , значительно превышающей однородную ширину ЭПР и ядерную зеемановскую частоту. Пусть на эту систему действует линейно-поляризованное вдоль оси x РЧ поле с частотой Ω , близкой к частоте ЯМР, приблизительно равной $A_n/2$. Гамильтониан задачи имеет вид

$$\mathcal{H} = \omega_s S^z - \omega_I I^z + A_n \sum_i S_i^z I_i^z + \mathcal{H}'_d + \frac{A_{\perp}}{2} \sum_i (S_i^+ I_i^- + S_i^- I_i^+) + 2\gamma_e H_1 S^x \cos \Omega t - 2\gamma_I H_1 I^x \cos \Omega t, \quad (1)$$

где $\omega_s = \gamma_e H_0$, $\omega_I = \gamma_I H_0$, \mathcal{H}'_d — секулярная по отношению к первым трем членам (1) часть электронного *dd* взаимодействия, $2H_1$ — амплитуда РЧ поля. Преобразуя (1) к вращающейся с частотой ω_s системе координат и затем с учетом неравенства $\Omega \ll \omega_s$ проводя усреднение эффективного гамильтониана по формуле [6]