вает отклонение **M** (Fe) от оси $\mathbf{C}_3$ к оси $\mathbf{C}_4$ на угол 3°, т. е. происходит понижение симметрии моментов — магнитный эффект Яна—Теллера [8]. При этом проекции **M** (Tb3) и **M** (Tb5) на ось $\mathbf{C}_3$ уменьшаются, что и приводит к скачку M. В области полей [12; 18] Тл происходит сближение двух нижних уровней в 1-й подрешетке Tb^{3+} до $\simeq 3\div 5$ см$^{-1}$, что ведет к дальнейшему отклонению **M** (Fe) от оси $\mathbf{C}_3$ (на 20°) и образованию в этой области устойчивой потенциальной ямы вплоть до $B\simeq 45$ Тл (см. рисунок). При $B=(19;\ 22]$ Тл происходит сближение до 10—15 см$^{-1}$ двух нижних уровней в 4-й и 6-й подрешетках, что и определяет скачок M на 1.5 $\mu_Б$. Когда $B=B_{мол}=28$ Тл, **B** и $\mathbf{B}_{мол}$ неколлинеарны, что и объясняет несимметричность M (B) относительно точки 28 Тл. Расчетная структура семи векторов в разных полях следующая: $B=0$ (момент в $\mu_Б$, угол отклонения от оси $\mathbf{C}_4$ в град), Fe^{3+} — (5; 0), Tb^{3+}: 1, 2 — (8.42; 180); 3, 5 — (8.55; 140); 4, 6 — (8.53; 160). Числа перед скобками — номера подрешеток Tb^{3+}. При $B\neq 0$ угол отсчитывается от оси $\mathbf{C}_3$. $B=5$ Тл: Fe^{3+} — (5; 0), Tb^{3+}: 1, 3, 5 — (8.48; 153); 2, 4, 6 — (8.69; 158). $B=8$ Тл, Fe^{3+} — (5; 2.3); Tb^{3+}: 1 — (8.27; 157); 2 — (8.64; 157); 3, 5 — (8.5; 94); 4, 6 — (8.63; 151). $B=22$ Тл, Fe^{3+} — (5; 17.8), Tb^{3+}: 1, 2 — (8.2; 125); 3, 5 — (7.8; 138.6); 4 — (8.24; 98); 6 — (8.24; 80). $B=28$ Тл, Fe^{3+} — (5; 17.8), Tb^{3+}: 1 — (7; 103); 2 — (7.9; 104); 3, 5 — (7.36; 61.3); 4, 6 — (6.62; 83.6). Расчет для $\mathbf{B} \parallel \mathbf{C}_4$, $x=0.26$ также дает близкое совпадение с экспериментом.

Список литературы

[1] Демидов В. Г., Левитин Р. З., Попов Ю. Ф. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 2. С. 596—601.
[2] Валиев У. В., Кринчик Г. С., Левитин Р. З., Мукимов К. М. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. № 4. С. 239—243.
[3] Лагутин А. С., Дмитриев А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 2959—2965.
[4] Звездин А. К., Мухин А. Л., Попов А. И. // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. № 3. С. 1097—1109.
[5] Бабушкин Г. А., Дружинина Р. Ф., Шкарубский В. В. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 8. С. 2534—2536.
[6] Дружинина Р. Ф., Шкарубский В. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 2. С. 595—597.
[7] Белов К. П., Гапеев А. К., Левитин Р. З., Маркосян А. С., Попов Ю. Ф. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 1. С. 241—248.
[8] Звездин А. К., Мухин А. А., Попов А. И. // Письма в ЖЭТФ. 1976. Т. 23. № 5. С. 267—271.
[9] Dillon J. F., Walker L. R. // Phys. Rev. 1961. V. 7. № 5. P. 1401—1412.

Московский
инженерно-физический институт
Отделение № 4
Арзамас

Поступило в Редакцию
6 июня 1988 г.
В окончательной редакции
7 февраля 1989 г.

УДК 538.958

Физика твердого тела, том 31, в. 6, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 6, 1989

ЛОКАЛЬНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

С. В. Божокин

Известно, что дислокации в полупроводниках приводят к появлению в запрещенной зоне электронных состояний [1], а также создают локализованные у дислокации фононные колебания акустического типа [2-4]. В работе [5] показано, что дислокации также могут приводить к появлению локальных колебаний оптического типа, причиной которых является короткодействующее возмущение силовой матрицы, вызванное ядром дислокации. Однако, кроме такого короткодействующего возмущения, дислокация создает вокруг себя медленно меняющиеся поля упругих напряжений, которые также могут приводить к появлению локальных оптических колебаний.

Целью данной работы является нахождение спектра мелких фононных уровней оптического типа, обусловленных дальнодействующими полями упругих напряжений винтовой дислокации.

Гамильтониан H_0, описывающий динамику длинноволновых оптических колебаний в идеальном ковалентном кристалле, имеет вид

$$H_0=\int d^3r\left\{\frac{1}{2}\dot{v}_i(\mathbf{r},t)\dot{v}_i(\mathbf{r},t)+\frac{1}{2}\omega_0^2v_i(\mathbf{r},t)v_i(\mathbf{r},t)+A_{iklm}\frac{\partial v_i(\mathbf{r},t)}{\partial x_k}\frac{\partial v_l(\mathbf{r},t)}{\partial x_m}\right\}, \quad (1)$$

где $v_i(\mathbf{r},t)$ — вектор, характеризующий относительное смещение атомов в элементарной ячейке; ω_0^2 — предельная частота оптических фононов. Последнее слагаемое в (1) играет роль кинетической энергии оптических фононов, причем A_{iklm} — тензор четвертого ранга, описывающий их дисперсию. Потенциальная энергия взаимодействия оптических фононов с полями упругих напряжений дислокации H_{int} может быть представлена в виде [6, 7]

$$H_{\text{int}}=\int d^3rB_{ijmn}v_i(\mathbf{r},t)v_j(\mathbf{r},t)u_{mn}^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где

$$u_{mn}^{(0)}(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\left[\partial u_m^{(0)}(\mathbf{r})/\partial x_n+\partial u_n^{(0)}(\mathbf{r})/\partial x_m\right]$$

— тензор статической деформации, созданный дислокацией; $u_n^{(0)}(\mathbf{r})$ — компонента вектора смещения; B_{ijmn} — тензор четвертого ранга, обусловленный ангармонизмом колебаний решетки. Для случая изотропного кристалла дифференциальное уравнение для определения спектра локальных оптических колебаний $v_i(\mathbf{r},t)=v_i(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)$ может быть представлено в виде

$$\left[\omega^2-\omega_0^2-\lambda_0\omega_0^2u_{kk}^{(0)}(\mathbf{r})\right]v_i(\mathbf{r})-2\lambda_0\omega_0^2u_{ij}^{(0)}(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})-$$
$$-\omega_0^2a^2\left[p_1\Delta v_i(\mathbf{r})+p_2\frac{\partial}{\partial x_i}\operatorname{div}\mathbf{v}(\mathbf{r})\right]=0, \quad (3)$$

где a — постоянная решетки; λ_0, p_1, p_2 — феноменологические параметры порядка единицы, микроскопические выражения для которых приведены в [6].

Для нахождения спектра локальных оптических колебаний, характеризующихся вектором смещений $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, рассмотрим винтовую дислокацию в изотропном кристалле, вектор Бюргерса которой a направлен вдоль оси z, а отличные от нуля компоненты полей упругих напряжений имеют вид $\partial u_z^{(0)}/\partial x=-a\sin\varphi/2\pi\rho$, $\partial u_z^{(0)}/\partial y=a\cos\varphi/2\pi\rho$. При этом удобно перейти в цилиндрическую систему координат, где $\mathbf{e}_\rho$, $\mathbf{e}_\varphi$, $\mathbf{e}_z$ — соответствующие орты, а вектор оптических смещений имеет проекции $\mathbf{v}(\mathbf{r})=(v_\rho, v_\varphi, v_z)$. В уравнении (3) слагаемое, описывающее потенциальную энергию взаимодействия винтовой дислокации с оптическими фононами, имеет вид $-a\lambda_0\omega_0^2\left[v_z(\mathbf{r})\mathbf{e}_\varphi+v_\varphi(\mathbf{r})\mathbf{e}_z\right]/2\pi\rho$. Отметим, что в случае дислокации эффективный потенциал U, действующий на оптические фононы, пропорционален $U\sim1/\rho$, где $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$ — двумерный радиус-вектор, поэтому в таком потенциале не происходит падения частицы на центр. Это отличается от случая сферически-симметричного точечного дефекта, рассмотренного в работе [6], где потенциал $U(\mathbf{r})$ зависит от сферического радиус-вектора по закону $U(r)\sim1/r^3$.

Разделяя переменные для каждой из проекций вектора $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ по правилу

$$\mathbf{v}(\mathbf{r})=\sum_m\mathbf{v}_m(\rho)\exp i(m\varphi+k_zz), \quad (4)$$

где $m=0, 1, 2\ldots$, k_z — волновой вектор вдоль оси z, мы получим связанную систему уравнений для «радиальных» частей вектора смещений

$v_{\rho m}(\rho)$, $v_{\varphi m}(\rho)$, $v_{zm}(\rho)$. Исключая из этой системы функции $v_{\rho m}$ и $v_{\varphi m}$, можно получить дифференциальное уравнение для величины v_{zm}. Можно показать, что асимптотики радиальных функций на малых расстояниях $x=\rho/a \ll 1$ имеют вид $v_{\rho m} \sim x^{m+1}$, $v_{\varphi m} \sim x^{m+1}$, $v_{zm} \sim x^{m+2}$. Для произвольных значений $x=\rho/a$ функцию $v_{zm}(x)$ можно представить в виде

$$v_{zm}(x) = x^{m+2} \sum_{k=0} Z_k x^k, \tag{5}$$

где Z_k — соответствующие коэффициенты разложения. В частном случае аксиально-симметричных возмущений величины $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, для которых $m=0$ (4), уравнение для функции $v_{\rho 0}(x)$ отщепляется, а для коэффициентов Z_k, определяющих функцию v_{z0} в пределе $k_z a \ll 1$, существуют рекуррентные соотношения

$$(k+2)(k+4)^3 Z_{k+2} - [2\alpha^2(k+2)(k+3)+\beta^2] Z_k + \alpha^4 Z_{k-2} = 0, \tag{6}$$

где $\alpha^2=(\omega^2-\omega_0^2)/p_1\omega_0^2$, $\beta=\lambda_0/2\pi p_1$, а величины p_1, λ_0 — численные коэффициенты порядка единицы, определенные в уравнении (3).

Нам необходимо найти такие значения величины α, определяющие энергию локального оптического фонона ω, которые позволяют исключить неограниченно возрастающие решения для функции $v_{zm}(x)$. Из уравнения для функции $v_z(x)$ можно показать, что при больших значениях $x=\rho/a \gg 1$ асимптотика $v_{zm}(x) \sim \exp(-\alpha x)$, поэтому мы будем искать функцию $v_{zm}(x)$ в виде $v_{zm}(x)=x^{m+2}\,\Phi(x)\exp(-\alpha x)$, где функция $\Phi(x)$ представляет собой некоторый полином порядка n. Представив коэффициент Z_k в виде $Z_k=(-\alpha)^k\Phi_k/k!$, из уравнения (6) можно получить рекуррентные соотношения для неизвестных коэффициентов Φ_k. Асимптотическое поведение функции $v_{zm}(x)$ при $x=\rho/a \gg 1$ означает исследование коэффициентов Φ_k при больших значениях $k \gg 1$, для которых $\Phi_{k\pm 2}=\Phi_k \pm 2d\Phi_k/dk$. Если $\Phi(x)$ представляет собой полином порядка n, то это означает, что асимптотика коэффициентов Φ_k при $k \gg 1$ имеет вид $\Phi_k \sim k^n$. Это условие и определяет собственные значения энергии оптического фонона

$$\frac{\omega^2-\omega_0^2}{\omega_0^2} = \frac{\lambda_0^2}{4\pi^2 p_1(25+24n)}, \tag{7}$$

где n — целое число, $n=0, 1, 2, 3 \ldots$ Для основного состояния энергия локализованного у винтовой дислокации фонона равна $(\omega^2-\omega^2)/\omega_0^2=\lambda_0^2/100\pi^2 p_1$. Данный результат примерно совпадает с оценкой частоты квазилокального оптического колебания в скалярной модели кристалла $\mathbf{v}(\mathbf{r})=(0, 0, v_z(\mathbf{r}))$ [3], если моделировать дислокацию изотропным потенциалом двумерного кулоновского потенциала, который пропорционален величине $u_{kk}^{(0)}(\rho) \sim a/2\pi\rho$ [8]. В пределе $k_z a \ll 1$ решение такой задачи имеет вид $(\omega^2-\omega_0^2)/\omega_0^2=\lambda_0^2/16\pi^2 p_1 (N-1/2)^2$, где $N=1, 2, 3$ — главное квантовое число.

Влияние дислокаций на инфракрасные спектры полупроводников было экспериментально обнаружено в работах [9, 10]. В этих работах показано, что изменение инфракрасного поглощения обусловлено локальными колебаниями, вызванными дислокациями в полупроводниках.

Список литературы

[1] Лифшиц И. М., Пушкаров Х. И. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т. 11. № 9. С. 456—459.
[2] Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев, 1981. 328 с.
[3] Косевич А. М. // ФНТ. 1978. Т. 4. № 7. С. 902—913.
[4] Божокин С. В., Паршин Д. А. // ФТТ. 1979. Т. 29. № 7. С. 2009—2016.
[5] Косевич А. М., Погребняк В. А. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. № 5. С. 1886—1893.
[6] Брыксин В. В., Фирсов Ю. А. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 3. С. 1025—1039.
[7] Альшиц В. И., Митлянский М. Д. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 5. С. 2073—2077.
[8] Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. М., 1981. 648 с.

[9] Веттегрень В. И., Кузминов Е. Г., Баптизманский В. В. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 4. С. 1136—1140.
[10] Ташбулатов Б. М., Веттегрень В. И., Новак И. И. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 1. С. 201—204.

Ленинградский политехнический
институт им. М. И. Калинина
Ленинград

Поступило в Редакцию
14 декабря 1988 г.
В окончательной редакции
10 февраля 1989 г.

УДК 546.542 : 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 6, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 6, 1989

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $CsPbBr_3$ И ЯКР АТОМОВ БРОМА

В. В. Петров, А. В. Лосев, А. В. Богданова, А. А. Крючин, М. И. Дашкевич, В. Г. Пицюга

Многообразие фазовых переходов (ФП) в галоидных соединениях со структурой перовскита и возможности их практического использования привлекают к ним постоянное внимание исследователей. В малоизученном кристалле $CsPbBr_3$ были обнаружены два ФП $O'_h \rightarrow D^5_{4h} \rightarrow D^{16}_{2h}$ [1, 2], а в [3] измерены упругие постоянные, обнаружившие значительные аномалии в области ФП. Представляет интерес исследовать аномалии диэлектрических свойств кристалла в этой области и спектр ЯКР. Кристаллы $CsPbBr_3$ были выращены методом Бриджмена с предварительной дополнительной очисткой бромидов. Измерения диэлектрической проницаемости проводились на неориентированном кристалле с использованием моста высокой точности типа ВМ 400G на частоте 200 Гц, относительная погрешность измерения ε не превышала 1.0 %. Контакты на пластинку кристалла напылялись из меди; для предотвращения окисления контактов измерения ε выполнялись в атмосфере аргона. Спектры ЯКР брома записывались на спектрометре типа ИСШ-13. В качестве регулятора температуры кристалла пользовались ВРТ-3.

На рис. 1, *а* представлена температурная зависимость диэлектрической проницаемости. При температуре T_1=420 К наблюдается аномалия диэлектрической проницаемости, свидетельствующая о сегнетоэлектрическом переходе. В области ФП ($T < T_1$) изменения ε описываются формулой Кюри—Вейсса (рис. 1, *б*)

$$\varepsilon = \frac{C}{|T - T_c|}, \tag{1}$$

где C=7.3·10³ К, T_{c1}=405 К. Скачкообразное изменение ε и наличие температурного гистерезиса ($\Delta T \simeq 13$ К) указывают на то, что в данном случае имеет место ФП первого рода, обусловленный конденсацией моды M_3 и исчезновением центра инверсии. Оценка степени напряженности связей Cs—Br, Pb—Br показывает, что ион цезия «свободно» перемещается в полости, а ион Pb^{2+} «сжат» в октаэдре, образованном ионами брома. Поэтому октаэдры $[PbBr_6]$ могут совершать разворот вокруг одной из осей с одновременным искажением, а ион цезия смещаться от центра куба. Используя значение T_{c1}, можно оценить смещение гомополярного атома по формуле $T_{c1}=(2.00 \pm 0.09) \cdot 10^4 (\Delta z)^2$ [4]; отсюда Δz=0.014 нм.

Аномалия диэлектрической проницаемости при T_2=360 К обусловлена ФП второго рода, значения постоянных уравнения Кюри—Вейсса равны: C=6.2·10³ К, T_{c2}=385 К.