

## ДЭЯР НЕЧЕТКИХ ИЗОТОПОВ $Gd^{3+}$ В ОРТОВАНАДАТЕ ИТТРИЯ

А.Д.Горлов, А.П.Потапов, Л.И.Левин

В работе описаны результаты изучения собственного сверхтонкого (СТВ) и квадрупольного взаимодействий (КВ) нечетких изотопов гадолиния в кристалле  $YVO_4$  методом нутационного ДЭЯР [1]. ДЭЯР измерения были предприняты с целью уточнения константы КВ —  $P_2^0$ , величина которой, полученная нами из ЭПР данных, существенно отличалась от  $P_2^0$  для  $^{155}GdVO_4$ , определенной из  $\gamma$ -резонансных спектров [2]. Кроме того, поскольку величины параметра начального расщепления  $b_2^0$  в  $GdVO_4$  [3] и  $YVO_4:Gd^{3+}$  [4] заметно различаются, была возможность проверить применимость развитой в [5] теории, согласно которой любое изменение  $b_2^0$  должно сопровождаться соответствующим изменением  $P_2^0$ .

Все ЭПР и ДЭЯР измерения проводились при температуре  $T = 1.8$  К на супергетеродинном спектрометре 3-см диапазона. Изучались номинально чистые монокристаллы  $YVO_4$ , где ионы гадолиния присутствовали как сопутствующие ионам иттрия в шихте. Спектры ЭПР в ориентациях внешнего магнитного поля  $H \parallel C_4$  и  $H \perp C_4$  (стандартная для циркониевых структур система координат [4]) имели хорошо разрешенную сверхтонкую структуру (СТС), связанную с  $^{155}Gd^{3+}$  и  $^{157}Gd^{3+}$ .

В табл. 1 приведены параметры спин-гамильтониана для симметрии  $D_{2d}$  [4], полученные численной минимизацией на ЭВМ среднеквадратичного отклонения экспериментальных и расчетных положений сигналов ЭПР четных изотопов гадолиния, описывающие наблюдаемый спектр с точностью 0.3 Гс. Видно, что диагональные параметры в пределах ошибок совпадают с результатами [4]; значения же  $b_4^4$  и  $b_6^4$  несколько отличны, что, скорее всего связано с переоценкой точности теории возмущений, используемой в [4] при их определении.

Таблица 1

Параметры спин-гамильтониана, описывающего спектр ЭПР  
четных изотопов  $Gd^{3+}$  в  $YVO_4$  при  $T = 1.8$  К (в МГц)

$g_{\parallel}$	$g_{\perp}$	$b_2^0$	$b_4^0$	$b_4^4$	$b_6^0$	$b_6^4$
1.9919(7)	1.9919(7)	-1438(2)	-4.9(4)	127(3)	1.5(4)	1(5)

Спектры нутационного ДЭЯР измерялись в основном в ориентациях  $H \parallel C_4$  и  $H \perp C_4$ , причем  $H$  всегда устанавливалось на вершину компонент СТС (сигнала поглощения) с целью устранения ошибок, связанных с разбросом параметров СТВ и КВ, обусловленных дефектностью кристалла и низкосимметричными искажениями. Набор констант СТВ и КВ, описывающий экспериментальный спектр ДЭЯР нечетких изотопов иона  $Gd^{3+}$  в  $YVO_4$ , приведен в табл. 2. Все обозначения констант общепринятые. Вид используемого при описании спектра спин-гамильтониана можно найти в [1].

Константы электронно-ядерного и квадрупольного взаимодействий, описывающие спектр ДЭЯР нечетных изотопов  $Gd^{3+}$  в  $YVO_4$  (в МГц)

Изотоп	$A$	$B$	$P_2^0$	$Q$	$A_1 \cdot 10^5$	$A_2 \cdot 10^5$
155	12.343(3)	12.356(6)	55.052(11)	-0.67(9)	-16(8)	-10(25)
157	16.202(3)	16.215(6)	58.644(10)	-0.75(8)	-16(8)	-20(40)

Примечание. Ядерные  $g$ -факторы табличные.

Сравнивая значение  $P_2^0 = 43.7(18)$  МГц, полученное из  $\gamma$ -резонансных спектров [2], и значение  $D = b_2^0 = -1750$  МГц для  $^{155}GdVO_4$  [3] с нашими результатами, видим, что знаки параметров совпадают, хотя величины заметно различны (табл. 1, 2). Таким образом, можно предположить, что обменное и диполь-дипольное взаимодействия ионов  $Gd^{3+}$  в  $GdVO_4$  дают отрицательные вклады в эти параметры. Это подтверждается и моделью, предложенной в [5], где (табл. 1) показано, что  $\Delta b_2^0 < 0$  должно соответствовать  $\Delta P_2^0 < 0$ .

На основе экспериментальных значений  $b_2^0$  и  $P_2^0$  была сделана оценка в суперпозиционной модели [6,7] значения кристаллического потенциала  $A_2^0$  по методике, предложенной в [5]. Рассчитанное значение  $A_2^0$  для  $^{157}Gd^{3+}$  в  $YVO_4$  совпадает по знаку, но в 4 раза больше экспериментального [5]. Если при расчетах использовать не феноменологические, а структурные факторы, определенные из координат 8 ближайших к  $Gd^{3+}$  кислородов, то значения  $A_2^0$ ,  $b_2^0$  и  $P_2^0$  значительно отличаются от экспериментальных; кроме того,  $A_2^0$  и  $P_2^0$  имеют обратные знаки. Аналогичные результаты получаются и для  $GdVO_4$ . Следовательно, можно сделать вывод о том, что различие расчетных и экспериментальных параметров, определяющих штарковское расщепление электронных состояний  $Gd^{3+}$  в  $YVO_4$ , вряд ли возможно объяснить только малыми искажениями ближайшего окружения гадолиния. Подтверждением этому служит расчет для  $GdVO_4$ , где координаты лигандов определены точно. Скорее всего, главная причина «неудачного» использования суперпозиционной модели связана с перенормировкой феноменологических параметров модели [5,7] из-за сильных ковалентных связей в комплексе  $VO_4^{3-}$ . Так, например, в [8] показано, что такие связи в  $YPO_4$  приводят к «изменению» зарядов кислородов до  $-1.037$ . Происходит как бы «затягивание» электронной плотности  $O^{2-}$  в область  $V^{5+}$ , при этом меняется и перекрывание электронных состояний примесного центра и лигандов.

В заключение еще раз отметим, что, на наш взгляд, основная причина значительного различия параметров квадрупольного взаимодействия  $^{155}GdVO_4$  и  $^{155}Gd^{3+}$  в  $YVO_4$  — это обменное и диполь-дипольное взаимодействия в  $GdVO_4$ , причем увеличение  $P_2^0$  в ортованадате иттрия по сравнению с  $GdVO_4$  сопровождается уменьшением  $b_2^0$  по абсолютной величине.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы «Университеты России».

- [1] Горлов А.Д. и др. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 5. С. 1422–1426.  
 [2] Cashion J.D., Prowse D.B., Vas A. // J. Rhys. C. 1973. V. 6. N 16. P. 2611–2624.  
 [3] Cook D.C., Cashion J.D. // J. Phys. C. 1979. V. 12. N 3. P. 605–613.  
 [4] Rosental J., Riley R.F., Ranon U.U. // Phys. Rev. 1969. V. 177. N 2. P. 625–628; Urban W. // Phys. Stat. Sol. (b). 1971. V. 46. N 2. P. 579–591.  
 [5] Levin L.I., Gorlov A.D. // J. Rhys.: Condens. Matter. 1992. V. 4. N 8. P. 1981–1992.  
 [6] Newman D.J., Urban W. // Adv. Phys. 1973. V. 24. N 2. P. 793–810.  
 [7] Levin L.I. Rhys. Stat. Sol. (b). 1986. V. 134. N 1. P. 275–280.  
 [8] Бондарь И.А. и др. Соединения редкоземельных элементов. М.: Наука, 1983. 284 с.

НИИ физики и прикладной математики  
 при Уральском государственном университете  
 Екатеринбург

Поступило в Редакцию  
 10 июня 1993 г.

УДК 537

© Физика твердого тела, том 35, № 11, 1993  
 Solid State Physics, vol. 35, N 11, 1993

## ОЦЕНКА ПОЛОЖЕНИЯ УРОВНЯ ФЕРМИ В ТИТАНАТЕ СТРОНЦИЯ

*А.И.Дедык, Г.Д.Лоос, М.В.Павловская, Л.Т.Гер-Мартиросян*

В конденсаторных структурах на основе титаната стронция  $\text{SrTiO}_3$  ( $ST$ ) большую роль играют условия на контакте электрод– $ST$ , определяемые соотношением работ выхода  $ST$  и материала электрода. Известно, что работа выхода  $\Phi_{ST}$  существенно зависит от состояния поверхности, в частности от насыщения ее кислородом [1,2]. Поэтому в качестве характеристики материала удобно выбрать положение уровня Ферми вдали от поверхности. Соответствующие количественные данные в литературе отсутствуют.

Целью настоящей работы является оценка положения уровня Ферми в высококачественном монокристалле  $ST$  по экспериментальным температурным зависимостям проводимости и подвижности носителей заряда в предположении, что носителями заряда являются дырки в валентной зоне [3].

Были изготовлены конденсаторные структуры на основе монокристаллов  $ST$ , выращенных по методу Вернейля. Толщина структур 130–400 мкм, электроды из никеля наносились термическим испарением в вакууме. Измерения вольт-амперных характеристик образцов в полях до  $\sim 3 \cdot 10^5$  В/м позволили определить проводимость  $\sigma$  материала в интервале температур 4.2–400 К (рис. 1). Заметим, что при  $T \lesssim 100$  К получены значения  $\sigma$  лишь при двух значениях температуры, поэтому соответствующий участок усредненной зависимости изображен штрихом.

Для расчетов мы воспользовались экспериментально определенными значениями подвижности  $\mu$  свободных носителей заряда в монокристаллах  $ST$  в интервале температур 100–375 К [4] (рис. 1). Поскольку проводимость исследованных нами кристаллов весьма близка к проводимости образцов, описанных в работе [4] ( $10^{-10} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$  при  $T \simeq 300$  К), можно считать, что данные по подвижности и проводимости относятся к одинаковым кристаллам.