

гней активации  $\Delta E = 1.26$  эВ и изменяется от  $2 \cdot 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/В·с при 300 К до  $10^{-5}$  м<sup>2</sup>/В·с при 570 К (рис. 2).

Полученные ВАХ, наклон которых является функцией напряжения и времени, свидетельствуют о наличии в запрещенной зоне LiNbO<sub>3</sub> квазинепрерывно распределенных по энергиям ловушек. Наиболее приемлемой для их описания является модель гауссовского распределения [9].

С помощью двухлучевого спектрофотометра Spesord M-40 по методу двух толщин получена спектральная зависимость коэффициента оптического поглощения  $\alpha(h\nu)$  в интервале 0.5—4.1 эВ. Она имеет сложный характер и представляет собой суперпозицию перекрывающихся индивидуальных составляющих гауссовского типа. По методике [10] проведено разложение сложного контура на ряд гауссовских пиков. Определены параметры гауссовских составляющих: положение максимума  $h\nu_0$ , интенсивность в максимуме  $A$ , полуширина  $(\Delta h\nu)_{1/2}$ . Результаты разложения приведены в таблице.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Nagels P. // Hall Effect and its Application / Ed. C. L. Chien and C. R. Westlake. N. Y., Plenum Press, 1980. P. 253—280.
- [2] Рушников А. В. // Автореф. канд. дис. Л., 1976. 18 с.
- [3] Бунэ А. В., Пашков В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 10. С. 3024—3027.
- [4] Кузьминов Ю. С. // Электрооптический и нелинейно-оптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987. 264 с.
- [5] Вертопрахов В. Н., Сальман Е. Г. // Термостимулированные токи в неорганических веществах. Новосибирск: Наука, 1979. 333 с.
- [6] Гуенок Е. П., Кудзин А. Ю., Соколянский Г. Х. // УФЖ. 1976. Т. 21. № 5. С. 866—867.
- [7] Avramenko V. P., Kudzin A. Yu., Reprntcheva S. P., Sadovskaya L. Ya., Sokolianskii G. X. // Ferroelectrics. 1988. V. 82. P. 173—178.
- [8] Ламперт М., Марк П. Инжекционные токи в твердых телах: Пер. с англ. М.: Мир, 1973. 416 с.
- [9] Силиныш Э. А. Электронные состояния органических молекулярных кристаллов. Рига: Зинатне, 1978. 344 с.
- [10] Глебовский Д. Н., Крашенинников А. А., Бедрина М. Б., Зеликман П. И. // ЖПС. 1981. Т. 35. № 3. С. 926—928.

Днепропетровский  
государственный университет

Поступило в Редакцию  
7 февраля 1991 г.

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

## ФОТОУПРУГИЙ ЭФФЕКТ В КРИСТАЛЛАХ LiNbO<sub>3</sub> ПРИ КРУЧЕНИИ

*Р. О. Влох, Ю. А. Пятак, И. П. Скаб*

Как известно [1], фотоупругий эффект в кристаллах при воздействии однородных механических деформаций к настоящему времени довольно хорошо изучен. Однако исследования преломляющих свойств кристаллов при неоднородных деформациях с определенной конфигурацией, насколько нам известно, не проводились. Вместе с тем наиболее изученными типами неоднородной деформаций кристаллической среды являются кручение и изгиб [2]. Поэтому целью настоящей работы было изучение фотоупругого эффекта в кристаллах LiNbO<sub>3</sub> при кручении.

Из кристаллов ниобата лития (точечная группа симметрии  $3m$ ) были изготовлены образцы цилиндрической формы, при этом ось цилиндра совпадала с оптической осью кристалла. Скручивающий момент прилагался к основаниям цилиндрических образцов, т. е. кристалл скручивался

вокруг оптической оси и свет ( $\lambda=632.8$  нм) распространялся вдоль оси симметрии третьего порядка.

В результате исследований нами были получены зависимость возникающего под действием кручения двупреломления от величины скручивающего момента (рис. 1), а также распределение возникающего двупреломления по сечению образцов, перпендикулярному к оси симметрии третьего порядка (рис. 2). Как видно из рис. 2, двупреломление не возникает только в том случае, когда оптический луч распространяется через геометрический центр кругового сечения; во всех остальных случаях индуцированное кручением двупреломление увеличивается при смещении оптического луча от центра кристалла. В данном случае неоднородность распределения двупреломления по сечению кристалла связана с неоднородностью распределения сдвиговых деформаций  $e_{31}$  и  $e_{32}$ , индуцирующих фотоупругий эффект.

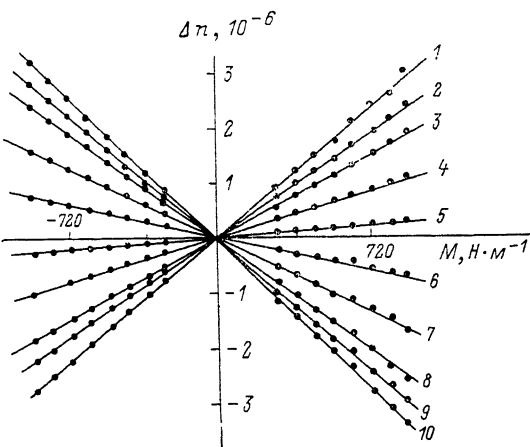


Рис. 1. Зависимости приращения двупреломления от скручивающего момента  $M$  при различных расстояниях  $L$  от центра круглого  $XY$  сечения кристаллов  $\text{LiNbO}_3$  ( $\lambda=632.8$  нм).  
 $L=-130$  (1),  $-100$  (2),  $-70$  (3),  $-40$  (4),  $-10$  (5),  $20$  (6),  $50$  (7),  $80$  (8),  $110$  (9),  $140$  мкм (10).

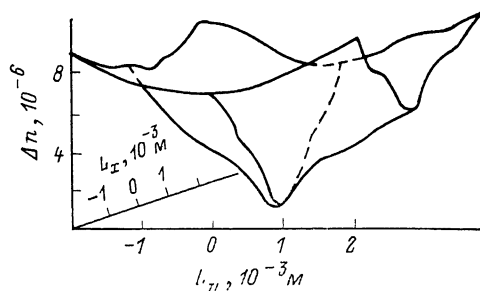


Рис. 2. Распределение индуцированного постоянным скручивающим моментом  $M=1.68 \cdot 10^3$  Н/м двупреломления по  $XY$ -сечению кристалла  $\text{LiNbO}_3$  ( $\lambda=632.8$  нм).

Нами также было изучено распределение коноскопических картин при сканировании лазерным лучом по  $XY$ -сечению кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Как оказалось, данное распределение соответствует ориентации кристалла  $\text{LiNbO}_3$ , т. е. общая картина распределения коноскопических картин, а следовательно, и оптических индикатрис (рис. 3) имеет особые направления, которые совпадают с кристаллофизическими осями  $X$  и  $Y$ . Так, при сканировании световым лучом в плоскости  $XZ$  и распространении света вдоль оси  $Z$  поворот индикатрисы не обнаруживается, а при сканировании лучом в плоскости  $YZ$  и распространении света вдоль оси  $Z$  обнаруживается поворот индикатрисы на угол  $\pm 45^\circ$ . Действительно, уравнения оптической индикатрисы для кристаллов, обладающих симметрией  $3m$ , при наличии сдвиговых деформаций  $e_{31}$  и  $e_{32}$  имеют вид

$$\begin{aligned}
 &(a_{11} + p_{14}e_{32})x^2 + (a_{11} - p_{14}e_{32})y^2 + a_{33}z^2 + 2p_{44}e_{32}zy - 2p_{44}e_{31}zx - \\
 &\quad - 2p_{14}e_{31}xy = 1 \text{ в квадранте } XY, \\
 &(a_{11} - p_{14}e_{32})x^2 + (a_{11} + p_{14}e_{32})y^2 + a_{33}z^2 - 2p_{44}e_{32}zy - 2p_{44}e_{31}zx - \\
 &\quad - 2p_{14}e_{31}xy = 1 \text{ в квадранте } -XY, \\
 &(a_{11} - p_{14}e_{32})x^2 + (a_{11} + p_{14}e_{32})y^2 + a_{33}z^2 - 2p_{44}e_{32}zy + 2p_{44}e_{31}zx + \\
 &\quad + 2p_{14}e_{31}xy = 1 \text{ в квадранте } -X-Y, \\
 &(a_{11} + p_{14}e_{32})x^2 + (a_{11} - p_{14}e_{32})y^2 + a_{33}z^2 + 2p_{44}e_{32}zy + 2p_{44}e_{31}zx + \\
 &\quad + 2p_{14}e_{31}xy = 1 \text{ в квадранте } -YX,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где  $a_{ij}$  — поляризационные константы; ее поворот вокруг оси  $Z$  запишется в виде

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} 2\xi &= -e_{31}/e_{32} && \text{в квадранте } XY, \\ \operatorname{tg} 2\xi &= e_{31}/e_{32} && \text{в квадранте } -XY, \\ \operatorname{tg} 2\xi &= -e_{31}/e_{32} && \text{в квадранте } -X-Y, \\ \operatorname{tg} 2\xi &= e_{31}/e_{32} && \text{в квадранте } -YX. \end{aligned} \quad (2)$$

Данные уравнения полностью описывают приведенную картину распределения коноскопических картин. Так, элементарные объемы, находя-

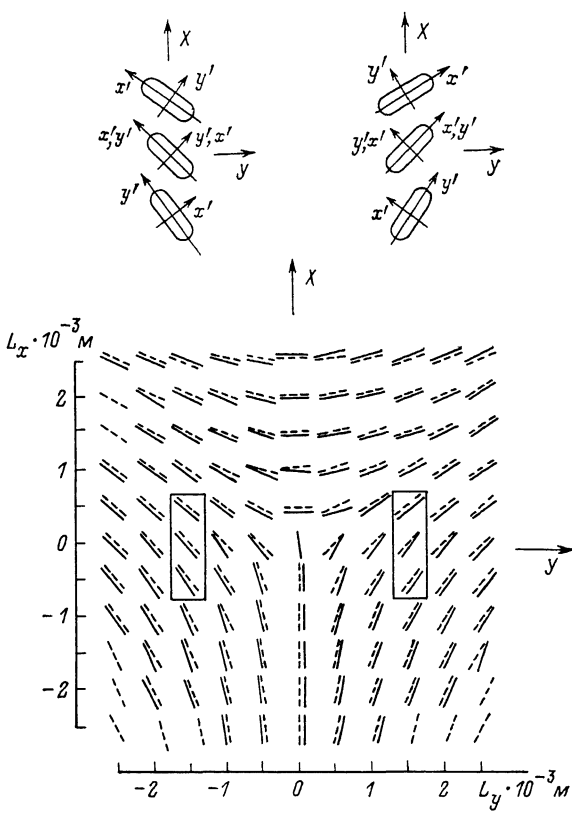


Рис. 3. Распределение оптических индикатрис в XY-сечении кристалла  $\text{LiNbO}_3$  при постоянном скручивающем моменте.

Штриховыми линиями обозначены теоретически рассчитанные ориентации оптических индикатрис по формулам (1), (2). На вставке — разворот оптической индикатрисы на угол  $90^\circ$  с сохранением ориентации длинной оси при переходе от квадрантов XY и X-Y к квадрантам -XY и -X-Y соответственно. Линиями обозначены ориентации осей X и Y оптических индикатрис.

щиеся в «плоскости» YZ, проходящей через центр цилиндрического образца, подвергаются деформации  $e_{32}$ , изменяющей знак при переходе через его центр, а элементарные объемы, находящиеся в «плоскости» YZ, проходящей через центр образца, подвергаются деформации  $e_{31}$ , также изменяющей знак при переходе через центр кристалла. Что же касается остальных элементарных объемов, то они при кручении подвергаются совместному действию деформаций  $e_{31}$  и  $e_{32}$ , а направление и величина поворота определяются по вышеприведенным формулам и зависят от знака и соотношения данных деформаций. Вместе с тем в данном случае существует интересная особенность: при переходе от квадрантов XY и X-Y к -XY и -X-Y соответственно оптическая индикатриса проворачивается на угол  $90^\circ$  с сохранением ориентации длинной оси (рис. 3, вставка). Данная

картина соответствует стыкующиванию кристаллофизической оси  $X$  с осью  $Y$  в кристалле  $\text{LiNbO}_3$ .

Таким образом, в настоящей работе был изучен фотоупругий эффект в ниобате лития, а также экспериментально исследовано и объяснено распределение оптических индикатрис при кручении кристаллов  $\text{LiNbO}_3$ .

### 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 (в). 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 (в). 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