

- [1] Баженов А. В., Осипьян Ю. А., Штейнман Э. А. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 2. С. 389—394.
 [2] Баженов А. В., Красильникова Л. Л. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 2. С. 590—593.
 [3] Рашба Э. И. // ЖОС. 1957. Т. 2. № 1. С. 75—87.
 [4] Воронов В. П., Косевич А. М. // ФНТ. 1979. Т. 76. № 3. С. 371—375.
 [5] Варданын Р. А., Киракосян Г. Г., Кравченко В. Я. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3565—3570.
 [6] Варданын Р. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 6. С. 2241—2248.
 [7] Перлин Ю. Е. // УФН. 1963. Т. 80. № 4. С. 553—595.

Институт физики твердого тела АН СССР
 Черноголовка
 Московская область

Поступило в Редакцию
 20 июня 1988 г.
 В окончательной редакции
 28 ноября 1988 г.

Физика твердого тела, том 31, в. 3, 1989

Solid State Physics, vol. 31, № 3, 1989

УДК 539.2

ЛОКАЛЬНАЯ ДИНАМИКА ТИТАНАТА БАРИЯ С ДЕФЕКТАМИ

М. В. Клопов, Н. Н. Кристофель

В настоящем сообщении приведены результаты расчета локальной динамики дефектов замещения в сегнетоэлектрическом кристалле BaTiO_3 , аналогичного проведенному для SrTiO_3 [1]. Динамика совершенного титаната бария изучена достаточно хорошо [2-6]. Фазовый переход типа смещения ($T_c = 120^\circ\text{C}$) связан здесь с мягкой модой симметрии F_{1u} в центре зоны Бриллюэна. Поэтому можно ожидать специфических температурных эффектов в локальной динамике дефектов в BaTiO_3 , особенно для F_{1u} колебаний.

Методика описания идеальной и возмущенной динамики кристалла изложена в [1]. В качестве исходных параметров простой оболочечной модели использовались данные [1] при $T = 260\text{ K}$, которые обрабатывались методом наименьших квадратов так, чтобы температурно-зависимые параметры для BaTiO_3 давали поведение мягкой моды, совпадающее с наблюдаемым. Остальные колебательные ветви зависят при этом от температуры весьма слабо. В отличие от SrTiO_3 для BaTiO_3 оказалось достаточным варьировать только эффективные ионные заряды. При 430 K $Z(\text{Ti}) = 4.677$, уменьшаясь немного с температурой, а $Z(\text{Ba}) = 1.585$ немного возрастает с температурой (расчеты велись до 700 K). Заряд кислорода определяется нейтральностью ячейки. Значения безразмерных электронных av^{-1} и короткодействующих поляризуемостей dv^{-1} , центральных \bar{A} и нецентральных \bar{B} силовых постоянных короткодействующего отталкивания (единицы $e^2/2v$) даны в таблице.

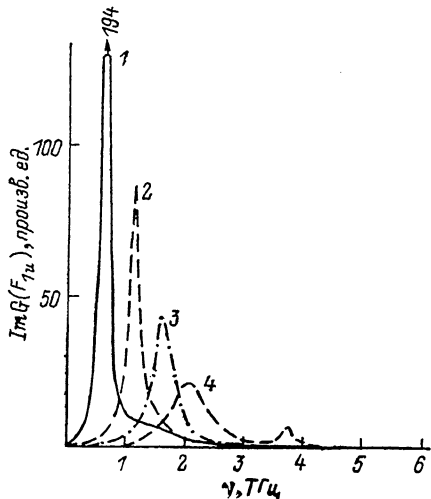
	Ti	Ba	O
av^{-1}	0.0023	0.0398	0.0284
dv^{-1}	0.0112	-0.5724	0.8985
	Ba-O	Ti-O	O-O
\bar{A}	22.77	328.7	2.033
\bar{B}	0.1961	-71.82	1.826

Применительно к примесной задаче аналогично [1] определялись эффективные центральная и нецентральная константы межионного взаимодействия T_i-O и их изменения ΔA и ΔB , обусловленные введением примеси замещения в позицию T_i . Локальные колебания в $BaTiO_3$ могут появляться над верхней границей спектра (21.8 ТГц) либо в щели (17.2 до 18.9 ТГц).

Высокочастотный участок спектра относится в значительной степени к колебаниям симметрии A_{1g} . В связи с этим для появления локальных A_{1g} колебаний достаточно слабого возмущения $\Delta A/A=0.03$, а для щелевой моды $\Delta A/A=-0.22$. В случае локальных E_g колебаний оба этих значения составляют около 40 %, т. е. щелевая и высокочастотная моды могут иметь место одновременно.

Критическое значение $\Delta B/B$ для щелевой моды F_{1g} равно 2.4, а для высокочастотной 3.9, что аналогично $SrTiO_3$.

Четные моды F_{1u} симметрии, проецирующиеся на мягкую моду основания, рассматривались в модели изотопического дефекта. Для воз-



Зависимость от температуры низкочастотного F_{1u} резонанса.

1 — 430, 2 — 520, 3 — 700 К. Параметры примеси: $Q=3.83$, $\Delta A/A=0.1$, $\Delta B/B=-0.15$. Кривая 4 — 520 К, $\Delta B/B=-0.11$.

никновения щелевых и локальных мод критическое относительное изменение массы Q составляет 0.5 и 0.43 соответственно. Частота этих мод от температуры практически не зависит.

Наибольший интерес представляют низкочастотные резонансы F_{1u} симметрии (аналогично F_{1g} резонансам в $SrTiO_3$), в которых следует ожидать температурного поведения, аналогичного мягкой моде. Это отображается в мнимой части возмущенной парциальной функции Грина по смещениям дефекта (см. рисунок). Для тяжелой примеси $Q=3.83$ (что отвечает замещению Ti на W) возникает хорошо выраженный низкочастотный резонанс, смягчающийся и сужающийся с температурой. Было принято $\Delta A/A=0.1$ и сравнены два случая $\Delta B/B=-0.15$, -0.1 . Учет изменения констант взаимодействия приводит к несколько более яркой выраженности резонанса. Положение резонанса достаточно чувствительно к параметрам возмущения, и вполне возможны случаи, когда резонанс достигает нуля частот до $T=T_c$. Это означает возникновение локальной структурной перестройки, срывающей фазовый переход на локально упорядоченное состояние [7, 8].

Список литературы

- [1] Клопов М. В., Кристофель Н. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3357—3361.
- [2] Shirane G., Yamada Y. // Phys. Rev. 1969. V. 177. N 2. P. 848—857.
- [3] Harada J., Axe J. D., Shirane G. // Phys. Rev. 1971. V. 4. N 1. P. 155—162.
- [4] Shirane G., Axe J. D., Harada J., Linz A. // Phys. Rev. 1970. V. B2. N 9. P. 3561—3567.
- [5] Jannot B., Escribe-Filippini C., Bouillot J. // J. Phys. C. 1984. V. 17. N 8. P. 1329—1337.
- [6] Servoin J. L., Luspain Y., Gervais F. // J. Phys. C. 1980. V. 13. N 9. P. 3761—3774.
- [7] Höck K.-H., Schäfer R., Thomas H. // Z. Phys. 1979. V. B36. N 1. P. 151—160.
- [8] Кристофель Н. Н. // Препринт F-21. Отд. физ.-мат. и техн. наук АН ЭССР. Тарту, 1984. С. 3—14.