

Для системы  $90^\circ$ -ДГ различие пропускания нейтронов двух длин волн отсутствует (рис. 2,  $\epsilon$ ,  $\delta$ ). Это связано с тем, что толщина  $90^\circ$ -ДГ меньше ( $\delta_{\text{теор}} = 800 \div 1000 \text{ \AA}$  [2]), а ширина пика пропускания для системы  $90^\circ$ -ДГ больше, чем для  $180^\circ$ -ДГ, что уменьшает влияние адиабатического переворота. Оценка ожидаемого эффекта для  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  для  $\delta_{\text{теор}}$  и реальной формы пика  $I_0(\alpha)$  дает величину, не выходящую за пределы экспериментальной ошибки.

Результаты работы показывают, что в разностном эксперименте по преломлению тепловых нейтронов удастся выделить вклад эффекта пере-

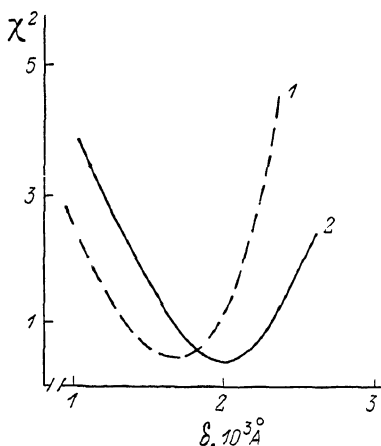


Рис. 3. Зависимость величины  $\chi^2$  от толщины  $\delta$  для результатов экспериментов по преломлению на системах ДГ (100) (1), (010) (2).

ворота спина при прохождении  $180^\circ$ -ДГ, а по величине этого вклада определить толщину ДГ в объеме ферромагнетика: в рамках простейшей модели блоховской стенки  $\delta = 1850 \pm 450 \text{ \AA}$ . Не исключено, что подобные эксперименты могут дать более тонкую информацию о внутренней структуре ДГ.

#### Список литературы

- [1] Newton R. R., Kittel Ch. // Phys. Rev. 1948. V. 74. P. 1604—1605. (Пер. в сб.: Физика ферромагнитных областей. М.: ИЛ, 1951. С. 300—303).
- [2] Lilley V. A. // Phil. Mag. 1950. V. 41. N 3. P. 792—811. (Пер. в сб.: Проблемы современной физики. Ферромагнетизм. М.: ИЛ, 1953. № 2. С. 6—24).
- [3] Драбкин Г. М., Трунов В. А., Шебетов А. Ф. // Письма в ЖЭТФ. 1969. Т. 10. № 11. С. 527—531.
- [4] Шильштейн С. Ш., Елютин Н. О., Соменков В. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 4. С. 1197—1199.
- [5] Schaerf O. // Physica B+C, 1975. V. 80. N 1—4. P. 289—300.
- [6] Шильштейн С. Ш., Соменков В. А., Каланов М. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. № 6. С. 2214—2220.
- [7] Наумов И. В., Петушков С. А., Подурец К. М., Соменков В. А., Тюгин А. Б., Шильштейн С. Ш. // ПТЭ. 1988. № 5. С. 42—44.
- [8] Квардаков В. В., Подурец К. М., Чистяков Р. Р., Шильштейн С. Ш., Елютин Н. О., Кулиджанов Ф. Г., Бродлер Я., Кадечкова С. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 400—408.

Институт атомной энергии  
им. И. В. Курчатова  
Москва

Поступило в Редакцию  
10 марта 1989 г.

УДК 537.611.43

Физика твердого тела, том 31, в. 7, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 7, 1989

## ИЗУЧЕНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ $\text{Li}^+$ В $\text{KTaO}_2$ МЕТОДОМ ЭПР

А. П. Печеный, Т. В. Антимирова, М. Д. Глинчук, И. М. Смолянинов

В последнее время в литературе дискутируется вопрос о возможности существования в кристалле  $\text{K}_{1-x}\text{Li}_x\text{TaO}_3$  сегнетоэластического фазового перехода (ФП), предшествующего сегнетоэлектрическому упорядоче-

нию [1], благодаря наличию у нецентральных ионов  $\text{Li}^+$  наряду с электрическим и упругого момента. Очевидно, что решение этого вопроса требует экспериментального определения величины и характера упругого дипольного момента  $\text{Li}^+$  в  $\text{KTaO}_3$ . Такая попытка была предпринята в [2], где исследование акустических свойств позволило определить квадрупольную часть тензора деформации  $\Omega_2 = \Omega_{11} - \Omega_{11}$ , определяющую сдвиговую деформацию, создаваемую нецентральными ионами  $\text{Li}^+$ . Однако для полной характеристики упругого момента ионов  $\text{Li}^+$  необходимо знать дилатационную часть тензора деформации  $\Omega_1 = \Omega_{11} + 2\Omega_{11}$ , которая не может быть определена из акустических измерений. Определение последней может быть проведено в результате изучения упругого уширения линии ЭПР парамагнитного зонда деформационными полями  $\text{Li}^+$ . Это оказывается возможным

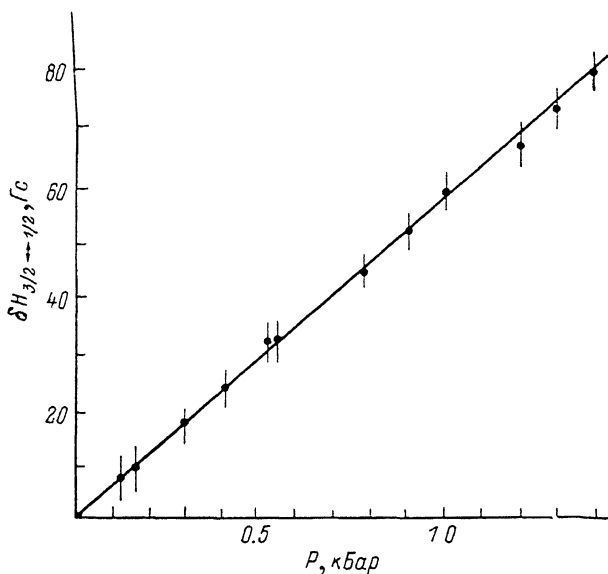


Рис. 1. Зависимость сдвига линии ЭПР «кубических» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{KTaO}_3$  (переход  $3/2 \leftrightarrow 1/2$ ) от величины приложенного одноосного давления  $P$ :  $P \parallel [001]$ ,  $H \parallel [100]$ .

при наличии сведений о чувствительности парамагнитных центров (ПЦ) к внутренним деформационным полям, т. е. о величинах спин-фононных коэффициентов  $\mathcal{F}_{ij}$ .

Настоящая работа посвящена определению спин-фононных коэффициентов ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{KTaO}_3$  на основании исследования влияния одноосного давления на их спектр ЭПР и определению локальных упругих характеристик нецентральных ионов лития в результате изучения упругого уширения линии ЭПР указанных ПЦ деформационными полями примесных ионов  $\text{Li}^+$ .

Исследовавшиеся монокристаллы  $\text{KTaO}_3$  выращены методом Чохральского. В качестве парамагнитного зонда использовался «кубический» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в позиции замещения иона  $\text{K}^+$ . Примесь железа вводилась в шихту в количестве 0.3 ат.%. Величины спин-фононных коэффициентов ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{KTaO}_3$  определены на основании изучения влияния на их спектр ЭПР деформации, возникающей при приложении к кристаллу одноосного давления, создаваемого специальной приставкой к радиоспектрометру 3-см диапазона РЭ-1306. Устройство позволяло развивать усилие до 70 кГ, что при площади образца 6—8 мм<sup>2</sup> соответствовало давлению  $\sim 1$  кбар.

Как показано в [3], зависимость сдвига линии ЭПР «кубического» ПЦ (переход  $m_s \leftrightarrow m_s - 1$ ) от приложенного аксиального давления  $P$  имеет вид

$$\delta H_{m_s \leftrightarrow m_s - 1} = (2m_s - 1) (3/4) \frac{\mathcal{F}_{11}}{c_{11} - c_{12}} P \quad (1)$$

в случае  $\mathbf{P} \parallel [001]$  при ориентации магнитного поля  $\mathbf{H} \parallel [100]$  и

$$\delta H_{m_s \leftrightarrow m_{s-1}} = -(2m_s - 1) (1/2) \frac{\mathcal{S}_{44}}{c_{44}} P, \quad (2)$$

когда  $\mathbf{P} \parallel [110]$  и  $\mathbf{H} \parallel [111]$ . Здесь  $c_{ij}$  — упругие модули  $\text{KTaO}_3$ ;  $\mathcal{S}_{11}$ ,  $\mathcal{S}_{44}$  — спин-фононные коэффициенты «кубического» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{KTaO}_3$ .

На рис. 1 представлена зависимость сдвига линии ЭПР «кубического» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$ , соответствующей переходу  $(3/2 \leftrightarrow 1/2)$ , от давления  $P$ , приложенного вдоль направления  $[001]$  при  $T=300$  К. Определенное из (1) значение  $\mathcal{S}$  оказалось равным  $\mathcal{S}_{11}=10.3$  см $^{-1}$ . При приложении давления вдоль  $\mathbf{P} \parallel [110]$  сдвиг указанной линии ЭПР при  $\mathbf{H} \parallel [111]$  не наблюдался в пределах ошибки эксперимента вплоть до  $P \sim 1$  кбар, что позволило оценить величину  $\mathcal{G}_{44}$  «сверху»:  $\mathcal{S}_{44} \leq 0.6$  см $^{-1}$ . Таким образом,  $\mathcal{S}_{44} \ll \mathcal{S}_{11}$ .

Как известно [4], нецентральные ионы  $\text{Li}^+$  создают в решетке  $\text{KTaO}_3$  электрические и деформационные поля, приводящие к уширению линий ЭПР. Знание констант спин-фононной связи «кубического» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в  $\text{KTaO}_3$  позволило использовать этот центр в качестве зонда для изучения деформационных полей. Угловая зависимость уширения линии ЭПР указанного ПЦ (переход  $3/2 \leftrightarrow 1/2$ ) при  $T=300$  К в  $\text{K}_{0.95}\text{Li}_{0.05}\text{TaO}_3$  пред-

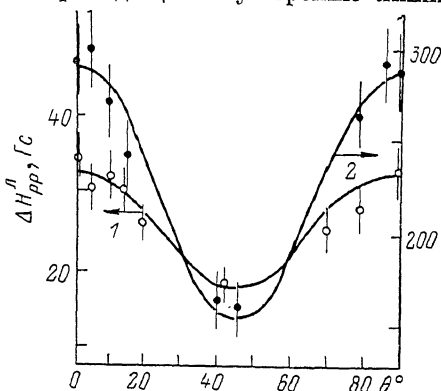


Рис. 2. Угловые зависимости уширения линии ЭПР «кубического» ПЦ  $\text{Fe}^{3+}$  в кристалле  $\text{K}_{1-x}\text{Li}_x\text{TaO}_3$  ( $x=0.05$ ) при  $T=300$  (1) и 77 К (2).

ставлена на рис. 2. При этой температуре высокочастотные  $\sim 10^{13}$  Гц [5] реориентации диполей  $\text{Li}^+$  приводят к отсутствию электродипольных и квадрупольных вкладов в уширение линии ЭПР, что позволяет предположить, что наблюдаемое при  $T=300$  К уширение связано с уширением ионами  $\text{Li}^+$  как дилатационными центрами. Расчет уширения линии ЭПР центрами дилатации, проведенный в рамках статистической теории формы линии [6], показал, что форма линии имеет лоренцев вид, а ее полуширина  $\delta^2$  в единицах частоты при ориентации магнитного поля вдоль одной из кубических осей кристалла

$$\delta^2 = 0.6n\gamma \frac{\mathcal{S}_{11}}{c_{11}} \Omega_1, \quad (3)$$

где  $n$  — концентрация примеси,  $\gamma$  — гиромангнитное отношение. Для произвольных ориентаций магнитного поля расчет уширения проводился на ЭВМ, и рассчитанная таким образом угловая зависимость дилатационного уширения приведена на рис. 2, 1. Как видно, рассчитанная теоретически угловая зависимость уширения хорошо согласуется с экспериментальной, что подтверждает дилатационный характер наблюдаемого уширения. Подставляя в (3) измеренную величину  $\mathcal{S}_{11}$  и экспериментальное значение уширения при  $\mathbf{H} \parallel [100]$ , получаем важную характеристику  $\Omega_1=1.4$  эВ. Сравнивая с измеренным в [2] значением  $\Omega_2$ , имеем  $\Omega_1/\Omega_2 \approx 10$ , что позволяет сделать вывод о сильной «вытянутости» локального деформационного искажения, создаваемого литием в направлении его нецентральности.

Близость величин  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  указывает на возможность существования в КТЛ сегнетоэластического фазового перехода [7]. Тем не менее оценки показывают, что полученный в [8] критерий сегнетоэластического ФП

$$\left( \frac{\Omega_1 - \Omega_2}{\Omega_1 + 2\Omega_2} \right)^2 > \frac{1}{n\gamma^2} \frac{r_c}{a} Q \quad (4)$$

(безразмерный параметр  $Q \sim 1$  для  $\text{KTaO}_3$ ,  $a$  — постоянная решетки) для  $\text{K}_{1-x}\text{Li}_x\text{TaO}_3$  ( $x=0.1$ ) при  $T \sim 100$  К выполняется слабо, что делает маловероятным существование в указанной системе сегнетоэластического упорядочения при указанной температуре, как предполагалось в [1].

Дипольный характер нецентральных ионов  $\text{Li}^+$  проявляется в уширении линии ЭПР при понижении температуры, когда частота дипольных реориентаций становится меньше создаваемого ими уширения, что имеет место уже при  $T=77$  К [5]. Как показано в [9], величина электродипольного уширения  $\Delta H_{pp}^E \simeq 130$  Гс в  $\text{K}_{0.95}\text{Li}_{0.05}\text{TaO}_3$  при  $H \parallel [100]$ ,  $T=77$  К оказывается значительно меньше наблюдаемой, что, по-видимому, связано с учетом полного деформационного вклада в ширину линии при этой температуре, как и отмечалось в [9].

Расчет вклада квадрупольного уширения, аналогичный расчету дилатационного уширения, приводит также к лоренцевой форме линии с полушириной при  $H \parallel [100]$ :  $\delta^{KB} = 1.7 n\gamma (\mathcal{E}_{11}/c_{11}) \Omega_2$ . Подставляя в это выражение  $\Omega_2 = 1$  эВ [2], получаем  $\Delta H_{pp}^{KB} \simeq 70$  Гс (при  $n \sim 5$  ат.%), что вместе с дилатационным вкладом  $\Delta H_{pp}^d \simeq 30$  Гс приводит к полному упругому уширению  $\Delta H_{pp}^{up} \simeq 100$  Гс. Таким образом, деформационный механизм уширения действительно вносит существенный вклад в ширину линии ЭПР кубических центров  $\text{Fe}^{3+}$  в КТЛ и сравним с электродипольным.

#### Список литературы

- [1] Yacoby J. // Z. Phys. B. 1981. V. 41. N 3. P. 269—276.
- [2] Höchli U. T., Weibel H. E., Rehwald W. // J. Phys. C. 1982. V. 15. N 30. P. 6129—6140.
- [3] Feher E. // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. N 1A. P. 145—157.
- [4] Вургмейстер Б. Е., Глинчук М. Д., Печеный А. П. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 11. С. 3389—3396.
- [5] van der Klink J. J., Rytz D., Borsa F., Höchli U. T. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 1. P. 89—101.
- [6] Stoneham A. M. // Rev. Mod. Phys. 1969. V. 41. N 1. P. 82—108.
- [7] Глинчук М. Д., Смолянинов И. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1197—1199.
- [8] Глинчук М. Д., Смолянинов И. М. // Тез. докл. IV Всес. школы-семинара. Днепропетровск, 1988. С. 26—29.
- [9] Вургмейстер Б. Е., Лагута В. В., Быков И. П., Кондакова И. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 8. С. 2449—2453.

Институт проблем  
материаловедения АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
9 ноября 1988 г.  
В окончательной редакции  
13 марта 1989 г.

УДК 621.318

Физика твердого тела, том 31, в. 7, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 7, 1989

## О ТЕРМОДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛА $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

А. И. Соколов

Недавно нейтронографическими и рентгеноструктурными методами, а также с помощью техники неупругого рассеяния нейтронов было исследовано поведение монокристаллов семейства  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при структурном фазовом переходе из тетрагональной в орторомбическую фазу [1, 2]. Фазовый переход является с экспериментальной точностью переходом второго рода и связан с конденсацией в точке X зоны Бриллюэна поперечных