где c — параметр решетки вдоль оси C для VO_2; V — объем элементарной ячейки VO_2. Зависимости $S_c(c)$, $p(V)$ определяются законом Гука

$$\partial S_c/\partial c = -E/c, \quad \partial p/\partial V = E/3V\,(2\sigma - 1), \tag{18}$$

где E — модуль Юнга, σ — коэффициент Пуассона. Из эксперимента известно, что $\partial T_c/\partial S_c = -1.2 \cdot 10^{-9}$, $\partial T_c/\partial p = 6 \cdot 10^{-11}$ К·см^2·дин$^{-1}$ [8], $(1/c)(\partial c/\partial x) = 0.132$ (для Nb) [1], $(1/V)(\partial V/\partial x) = 0.125$ (для Mo) [2]. Используя эти данные, а также значения $E = 3.8 \cdot 10^{11}$ дин·см$^{-2}$, $\delta = 0.17$, из (17), (18) получаем $\partial T_c/\partial x \approx 0.5$ К/%. Таким образом, деформационный механизм сдвига T_c (17) на порядок меньше электронного (16).

Авторы благодарят В. Ф. Киселева за интерес к работе и полезные замечания.

Список литературы

[1] Villenluve Q., Bordet A., Casalot A., Pouget J. P., Launois M., Lederer P. // J. Phys. Chem. Sol. 1972. V. 33. N 10. P. 1953—1959.

[2] Horlin T., Niklevsky T., Nygren M. // Mater. Res. Bull. 1973. V. 8. N 2. P. 179—190.

[3] Nygren M., Israelsson M. // Mater. Res. Bull. 1969. V. 4. N 12. P. 881—886.

[4] Бугаев А. А., Захарченя Б. П., Чудновский Ф. А. Фазовый переход металл—полупроводник и его применение. Л., 1979. 183 с.

[5] Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел: Пер. с англ. М., 1967. 491 с.

[6] Adler D., Brooks H. // Phys. Rev. 1967. V. 155. N 3. P. 826—840.

[7] Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах: Пер. с англ. М., 1978. Т. 1. 569 с.

[8] Larry A., Paul Ladd and William // Sol. St. Comm. 1969. V. 7. N 4. P. 425—428.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
15 марта 1989 г.

УДК 537.226+621.315

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 10, 1989

ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ТЕЛЛУРИДА ВИСМУТА

В. В. Соболев, В. М. Крамарь

Среди кристаллов группы $A_2^5B_3^6$ теллурид висмута выделяется как наиболее изученный и имеющий большие прикладные применения [1]. Однако теоретические расчеты зон для точек многих направлений зоны Бриллюена методом псевдопотенциала с учетом релятивистских эффектов появились совсем недавно [2]; рассчитано 14 валентных зон v_i и 12 зон проводимости c_j в общем интервале энергии $\sim$20 эВ.

При помощи правил отбора работы [3] и результатов расчетов [2] нами был определен спектр вероятных наиболее интенсивных 18 групп переходов B_i для поляризации $E \perp C$ между почти параллельными парами зон v_i и c_j в точках направлений зоны Бриллюена (в табл. 1 точки направлений приведены в скобках; переходы без указания точек направлений происходят по многим направлениям). Поверхность сколов теллурида висмута перпендикулярна оптической оси C. Поэтому спектры отражения R [4, 5] и дифференциальные спектры отражения TR [6], λR [7] измерены для $E \perp C$ (табл. 2). Впервые с помощью данных [2] возникла возможность предложить конкретную модель природы максимумов отражения и дифференциальных спектров в схеме междузонных переходов B_i (последний столбец табл. 2). Эта модель, конечно, весьма упрощена. Для более точного обсуждения зонной структуры [2], спектров отражения [4-7] и рас-

Таблица 1

Расчетные энергии переходов Bi_2Te_3 при $E \perp C$ и их природа [2]

	E, эВ	Природа переходов
B_1	1.15	$v_{13}—c_1\,(F,\ S)$, $v_{11}—c_1\,(\Delta)$, $v_{14}—c_2\,(\Lambda')$
B_2	1.7	$v_{13}—c_1\,(\Sigma',\ C,\ \Delta,\ R)$, $v_{14}—c_2\,(\Delta,\ S)$
B_3	2.0	$v_{12}—c_1\,(C,\ \Delta,\ S)$, $v_{11}—c_1\,(S,\ R)$, $v_{14}—c_2\,(\Sigma',\ F,\ R)$
		$v_{14}—c_3\,(C,\ R)$, $v_{14}—c_4\,(\Lambda,\ \Lambda')$
B_4	2.6	$v_{12}—c_1\,(\Sigma')$
B_5	2.9	$v_{12}—c_1\,(\Sigma')$, $v_6—c_1\,(\Lambda)$, $v_{10}—c_2\,(\Delta,\ R)$, $v_{13}—c_4\,(F,\ C)$
		$v_{11}—c_4\,(\Lambda)$, $v_9—c_4\,(\Lambda)$
B_6	3.2	$v_{12}—c_4\,(F)$
B_7	3.6	$v_7—c_3\,(\Lambda)$, $v_{13}—c_4\,(\Sigma')$, $v_{10}—c_3\,(F,\ C)$
B_8	4.0	$v_{11}—c_4\,(F,\ C)$, $v_6—c_4\,(\Lambda)$, $v_{12}—c_5\,(C,\ \Lambda')$, $v_{11}—c_5\,(\Lambda',\ S)$
B_9	4.6	$v_{11}—c_5\,(C)$, $v_9—c_3\,(F,\ C)$, $v_{12}—c_4\,(\Sigma')$, $v_5—c_3\,(C)$
		$v_6—c_1\,(S)$, $v_7—c_2\,(S)$
B_{10}	5.7	$v_{12}—c_5\,(\Sigma')$
B_{11}	7.0	$v_6—c_5\,(C,\ S)$, $v_6—c_4\,(C)$
B_{12}	7.5	$v_4—c_2\,(\Sigma')$, $v_6—c_4\,(\Sigma')$
B_{13}	8.0	$v_5—c_1$
B_{14}	10	$v_4—c_3$, $v_5—c_4$
B_{15}	10.8	$v_3—c_1$, $v_5—c_5$
B_{16}	12.7	$v_1—c_1$, $v_2—c_2$, $v_2—c_3\,(F)$, $v_3—c_4$
B_{17}	14.5	$v_1—c_4$
B_{18}	15.7	$v_1—c_5\,(\Sigma')$

Таблица 2

Энергии максимумов R, TR, λR и B_1 для $E \perp C$ Bi_2Te_3

E, эВ	R [4]		R [5]		TR [6]	λR [7]	[2]
	80 K	293 K	80 K	293 K	77 K	300 K	
E_1	1.32	1.25	1.36	1.36	1.43	1.35	B_1
E_2	1.77	1.77	1.80	1.80	1.77	1.77	B_2
E_3	(1.90)	—	—	—	1.89	—	
E_4	2.09	—	—	—	2.09	—	B_3
E_5	2.28	—	—	—	2.29	—	
E_6	(2.49)	—	—	—	2.50	—	B_4
E_7	2.91	2.97	2.90	2.95	2.91	3.04	B_5
E_8	3.17	—	—	—	3.25	3.18	B_6
E_9	3.30	—	3.4	3.4	—	3.31	
E_{10}	3.60	—	—	—	—	3.65	B_7
E_{11}	—	—	—	—	3.74	—	B_8
E_{12}	4.30	—	4.5	4.5	(4.20)	4.40	B_9
E_{13}	—	—	—	6.7	—	—	B_{11}
E_{14}	—	—	—	7.6	—	—	B_{12}
E_{15}	—	—	—	8.4	—	—	B_{13}
E_{16}	—	—	—	9.6	—	—	B_{14}
E_{17}	—	—	—	10.6	—	—	B_{15}

считанных фундаментальных оптических функций ε_2, ε_1 и других [4] Bi_2Te_3 в широкой области энергии необходимы в первую очередь теоретические расчеты спектра диэлектрической функции или отражения.

Список литературы

[1] Гольцман В. М., Кудинов В. А., Смирнов И. А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3. М.: Наука, 1972. 320 с.

[2] Олешко Е. В., Королышин В. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 9. С. 2856—2859.

[3] Greenaway D. L., Harbere G. // J. Phys. Chem. Sol. 1965. V. 26. N 10. P. 1585—1604.

[4] Соболев В. В., Крамарь В. М., Алексеев В. В. // Сб. «Материалы для полупроводниковой электроники». Кишинев: Штиинца, 1984. С. 98—105.

[5] Sobolev V. V., Shutov S. D., Popov Yu. V., Shestatskii S. N. // Phys. St. Sol. 1968. V. 30. N 1. P. 349—355.
[6] Taniguchi K., Moritani A., Hamaguchi C., Nakai J. // Surf. Sci. 1973. V. 37. N 2. P. 562—575.
[7] Grasso V., Mondio G., Saita G. // Nuovo Cimento B. 1975. V. 26. N 1. P. 233—242.

Институт прикладной физики АН МССР
Кишинев

Поступило в Редакцию
15 марта 1989 г.

УДК 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 10, 1989

НЕРЕЗОНАНСНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ОДНОИМПУЛЬСНОГО ЭХА В НЕОДНОРОДНО-УШИРЕННЫХ СПИН-СИСТЕМАХ

В. С. Кузьмин, А. П. Сайко

Недавно в [1] численными расчетами было подтверждено высказанное ранее [2] утверждение о возможности генерации одноимпульсного эха (ОЭ) после возбуждения хановской спиновой системы одиночным протяженным электромагнитным импульсом, несущая частота ω которого не совпадает с резонансной частотой спинов. Расчеты [1] проводились для случая, когда частота Раби ω_1 приблизительно равнялась неоднородной ширине линии σ, а площадь возбуждающего импульса полагалась достаточно большой $\omega_1\tau \gg 1$ (τ — длительность импульса). Проделать подробный анализ условий возбуждения ОЭ оказалось затруднительным в связи с невозможностью получения аналитических выражений для намагниченности системы при усреднении по контуру неоднородно-уширенной линии. К настоящему времени ОЭ наблюдалось экспериментально во многих магнитных материалах [2, 3], поэтому представляет интерес выяснение условий его формирования и определение границ применимости модели нерезонансного возбуждения ОЭ [2]. Настоящая заметка и посвящена этому вопросу.

Выражение для v-компоненты намагниченности спиновой системы, возникающей после возбуждения одним импульсом на частоте $\omega \neq \omega_0$ (ω_0 — центральная частота неоднородно-уширенной линии), можно записать в виде

$$v(t) = v_0\omega_1 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\Delta g(\Delta - \delta)\left[\frac{\sin\beta\tau}{\beta}\cos\Delta(t-\tau) + \frac{\Delta}{\beta^2}\cos\beta\tau\sin\Delta(t-\tau) - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{\beta^2}\sin\Delta(t-\tau)\right] \equiv \mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3, \quad t > \tau, \tag{1}$$

где $\beta = (\Delta^2 + \omega_1^2)^{1/2}$, $\delta = \omega_0 - \omega$, $g(x)$ — функция формы неоднородно-уширенной линии.

Проанализируем (1) на временно́м интервале $\tau \leqslant t \leqslant 2\tau$. Интеграл $\mathcal{J}_3$ берется по теории вычетов и состоит из суммы двух членов: экспоненциально затухающего со скоростью ω_1 и осцилляционно-релаксационного с частотой осцилляций δ и скоростью спада σ. Однако наиболее интересная информация содержится в $\mathcal{J}_1$ и $\mathcal{J}_2$. Оказывается, что поведение интегралов $\mathcal{J}_1$ и $\mathcal{J}_2$ почти на всем интересующем нас интервале времени достаточно хорошо аппроксимируется главным членом (пропорциональным $(\omega_1\tau)^{-1/2}$) их асимптотического разложения при $\omega_1\tau \gg 1$. Получающееся при этом простое аналитическое выражение определяет не только временно́е поведение отклика, но и позволяет непосредственно проанализировать его свойства в различных экспериментальных условиях.