

- [11] Дубовский О. А. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 1. С. 205—211.  
 [12] Toyozawa Y. // Progr. Theor. Phys. (Kyoto). 1959. V. 22. N 3. P. 455—465.  
 [13] Дубовский О. А., Орлов А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1688—1698.  
 [14] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963.

Поступило в Редакцию  
22 марта 1989 г.

УДК 538.222 : 538.113.092 : 546.657

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

## ИНВЕРСИЯ СОСТОЯНИЙ И СПИН-РЕШЕТОЧНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ИОНА ЦЕРИЯ В ЭТИЛСУЛЬФАТЕ ЛАНТАНА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

И. М. Крыгин, Г. Н. Нейло, А. Д. Прохоров

Ион церия в решетке этилсульфата лантана (ЭТС La) обладает редко встречающейся системой энергетических уровней, состоящей из двух близко расположенных крэммеровских дублетов [1]. В [2, 3] было показано, что энергетический интервал между основным и ближайшим возбужденным дублетами чувствителен к давлению и может как увеличиваться [2], так и уменьшаться [3]. Для данного иона в рассматриваемой матрице уменьшение энергетического интервала  $\Delta_1$  с ростом давления должно при-

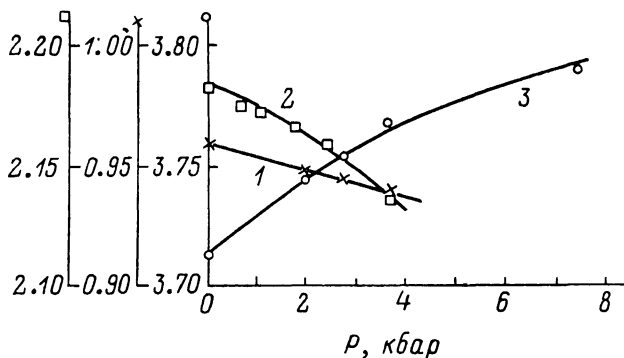


Рис. 1. Изменение  $g$ -факторов дублетов  $|\pm 5/2\rangle$  и  $|\pm 1/2\rangle$  от давления.

водить к уникальной ситуации: искусственному вырождению энергетических уровней (при  $\Delta_1=0$ ) и их инверсии при дальнейшем увеличении давления. Такая тенденция поведения  $\Delta_1$  от давления до 15 МПа была обнаружена в [4]. Сведения об энергетическом спектре трехвалентного церия в исследуемом кристалле необходимы также для установления природы спин-спинового взаимодействия между ионами церия, имеющего в данном кристалле ряд особенностей [5].

Кристаллическое поле ЭТС La с симметрией  $C_{3h}$  расщепляет основной мультиплет иона  $Cl^{3+} - 2F_{5/2}$  на три крэммеровских дублета:  $|\pm 1/2\rangle$ ,  $|\pm 3/2\rangle$ ,  $|\pm 5/2\rangle$ . Исследования магнитной восприимчивости и спектра ЭПР при атмосферном давлении однозначно указывают на то, что магнитные свойства иона определяются дублетом  $|\pm 1/2\rangle$ , который является основным и отделен от ближайшего по энергии возбужденного дублета  $|\pm 5/2\rangle$  энергетическим расстоянием  $\Delta_1=2 \text{ см}^{-1}$  [1]. Дублет  $|\pm 3/2\rangle$  расположен еще выше  $\Delta_2 \approx 80 \text{ см}^{-1}$  и заметного влияния на магнитные свойства при низких температурах не оказывает.

Для проведения измерений под давлением использовался сосуд высокого давления типа цилиндр—поршень с керосиномасляной средой. На рис. 1 изображено поведение  $g_{\parallel}$  (1, 3) и  $g_{\perp}$  (2) для дублетов  $|\pm 1/2\rangle$  (1, 2) и  $|\pm 5/2\rangle$  (3) при всестороннем сжатии. Выше давления  $P \approx 70$  МПа интенсивность линии поглощения дублета  $|\pm 1/2\rangle$ , основного при атмосферном давлении, падает, и при  $P \approx 0.4$  ГПа линия становится ненаблюдаемой. Такое поведение интенсивности можно объяснить инвертированием уровней, в результате чего основным становится дублет  $|\pm 5/2\rangle$ . Энергия состояния  $|\pm 1/2\rangle$  с ростом давления увеличивается, что приводит к уменьшению заселенности и падению интенсивности.

Для определения величины начального расщепления в работе [1] исследовались междублетные переходы. Однако в данном случае из-за негидростатичности среды эти линии уширены и под давлением не наблюдаются. В той же работе показано, что при атмосферном давлении спин-решеточная релаксация (СРР)  $\text{Cl}^{3+}$ : ЭТС La описывается процессом Орбаха—Аминова

$$T_1^{-1} = B \exp(-\Delta_1/kT)$$

с небольшой примесью комбинационных процессов. Так как наличие этого механизма позволяет извлекать информацию о  $\Delta_1$  из температурной зависимости скорости СРР, были проведены аналогичные измерения при всестороннем сжатии.

Исследования проводились в ориентации  $H_0 \parallel Z$  на частоте 9.3 ГГц методом импульсного насыщения по методике, описанной в [5].

Возможно, из-за недостаточной мощности клистрона, позволяющего насыщать линию ЭПР с временами релаксации не менее  $10^{-5}$  с, насыщение линии, принадлежащей переходу внутри дублета  $|\pm 5/2\rangle$ , происходит

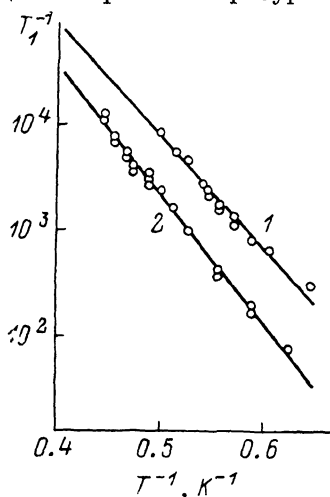


Рис. 2. Температурная зависимость скорости спин-решеточной релаксации иона  $\text{Cl}^{3+}$  в этилсульфате лантана при давлениях 6.8 ( $\Delta_1 = 16.3 \text{ см}^{-1}$ ) и 8.7 кбар ( $\Delta_1 = 19.3 \text{ см}^{-1}$ ) в инвертированном состоянии, когда  $H_0 \parallel C_3$ .

только при  $P \approx 0.6$  ГПа. На рис. 2 приведены температурные зависимости скорости спин-решеточной релаксации для давлений 0.68 (1) и 0.87 ГПа (2). Полученные результаты хорошо описываются процессом Орбаха—Аминова. Наклон прямых, соединяющих экспериментальные точки, определяет расстояние до возбужденного дублета. Из эксперимента следует, что скорость изменения междублетного расстояния  $\partial \Delta_1 / \partial P = 16 \text{ см}^{-1} / \text{ГПа}$ , что близко к значению  $\partial \Delta_1 / \partial P = 12 \text{ см}^{-1} / \text{ГПа}$ , полученному для ЭТС Eu и ЭТС Y [2]. Экспериментальные значения коэффициента  $B$  равны  $1.23 \times 10^9$  и  $2.5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$  при давлениях 0.68 и 0.87 ГПа соответственно, что близко к величинам, полученным при изучении ЭТС Y [2]. Это говорит о том, что спин-фононное взаимодействие имеет одну природу для обеих матриц и определяется в основном расстоянием до возбужденного дублета.

Скорость изменения энергетического интервала между дублетами, полученная в [4] для малых ( $< 20$  МПа) давлений, составляет  $\partial \Delta_1 / \partial P = 28 \text{ см}^{-1} / \text{ГПа}$  и отличается от результатов, полученных в данной работе. Такое различие, возможно, связано с величиной междублетного расщепления. Когда  $\Delta_1$  почти равно нулю, то система близка к вырожденному состоянию, более чувствительному, по всей видимости, к деформациям, чем сильно расщепленное.

В [6] приведено выражение, связывающее величину  $g$ -фактора с параметрами фононного спектра. С использованием экспериментальных зна-

чений входящих в него величин, проводя минимизацию зависимости  $g$  от давления, получено, что наибольший вклад в уменьшение  $g$  относительно теоретических значений, полученных в модели статического кристаллического поля, вносят фононы с частотами  $\approx 110 \text{ см}^{-1}$ , что хорошо согласуется с аналогичными расчетами, полученными в [2].

Таким образом, в данной работе наблюдалась уникальная ситуация, связанная с пересечением энергетических уровней под давлением, что должно вызывать существенное изменение магнитных свойств этого соединения.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Krigin I. M., Lukin S. N., Neilo G. N., Prokhorov A. D. // Phys. St. Sol. (b). 1981. V. 104. N 1. P. K21—K25.
- [2] Крыгин И. М., Нейло Г. Н., Прохоров А. Д. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 6. С. 2242—2250.
- [3] Neilo G. N., Prokhorov A. D., Tsintsadze G. A. // Phys. St. Sol. (b). 1977. V. 83. N 1. P. K59—K61.
- [4] Крыгин И. М., Лукин С. Н., Прохоров А. Д. // ФНТ. 1984. Т. 10. № 5. С. 499—502.
- [5] Крыгин И. М., Прохоров А. Д. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 2. С. 590—596.
- [6] Bagguley D. M. S., Vella—Coleiro G. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1969. Ser. 2. V. 2. P. 2310—2319.

Донецкий физико-технический  
институт АН УССР  
Донецк

Поступило в Редакцию  
4 апреля 1989 г.

УДК 548.571

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 10, 1989

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АТОМНЫХ ДЕФЕКТОВ ПО МЕХАНИЗМУ ВАРЛИ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

*В. В. Алексеенко, Б. И. Якобсон*

При взаимодействии ионизирующих излучений небольших энергий с твердыми телами основная доля их энергии идет не на процессы упругого смещения атомов, а на возбуждение электронной подсистемы кристалла [1]. Распад локализованных электронных возбуждений может приводить к образованию атомных дефектов. Одним из механизмов превращения энергии электронного возбуждения в образование атомных дефектов является механизм Варли [2]. До настоящего времени была выполнена единственная работа по численному моделированию этого в кристалле KCl [3], где полагалось, что размер катионов и анионов одинаков. Но в ряде кристаллов со структурой типа NaCl размер катионов почти в два раза меньше размера аниона [4]. Как показали наши исследования, этот факт имеет большое значение для атомного дефектообразования.

Расчеты проводились для системы  $9 \times 9 \times 9$  ионов, размещенных в узлах решетки с элементарной ячейкой типа NaCl. Граничные атомы жестко закреплялись. Потенциал межатомного взаимодействия выбирался в виде

$$U(R_{ij}) = \frac{e_i e_j}{R_{ij}} + C \frac{(\sigma_i + \sigma_j)^{12}}{R_{ij}^{12}}, \quad (1)$$

где  $e_i$  — заряд  $i$ -го иона,  $\sigma_i$  — его размер,  $R_{ij}$  — расстояние между ионами  $i$  и  $j$ . Выражение (1) удобно переписать в виде

$$U(r_{ij}) = \frac{\alpha_i \alpha_j}{r_{ij}} + P \left( \frac{\sigma_i + \sigma_j}{\sigma_+ + \sigma_-} \right)^{12} \frac{1}{r_{ij}^{12}}, \quad (2)$$