

и полагая, что ядерные спины равномерно распределены в полосе разброса статического сверхтонкого поля (а следовательно, и поля компенсации), т. е. что

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} 1/2(\Delta\varepsilon), & |\varepsilon| \leq (\Delta\varepsilon), \\ 0, & |\varepsilon| > (\Delta\varepsilon), \end{cases}$$

будем иметь¹

$$1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar U_{SN}}{2(\Delta\varepsilon)} \right) \int_{-(\Delta\varepsilon)}^{+(\Delta\varepsilon)} d\varepsilon \frac{\text{th}(\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}/2k_B T)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}, \quad (4)$$

откуда, используя известные результаты теории БКШ, найдем выражения для щели в спектре элементарных возбуждений $\Delta(T=0)$, спектра элементарных возбуждений $\delta(\varepsilon)$ и температуры фазового перехода T_c

$$\Delta(0) = \frac{\hbar(\Delta\nu)}{\text{sh}(2(\Delta\nu)/U_{SN})} \approx 2\hbar(\Delta\nu) \exp\left(-\frac{2\Delta\nu}{U_{SN}}\right), \quad (5)$$

$$\delta(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}, \quad (6)$$

$$T_c \approx 1.14 \frac{\hbar(\Delta\nu)}{k_B} \exp\left(-\frac{2(\Delta\nu)}{U_{SN}}\right), \quad (7)$$

где $(\Delta\nu) = ((\Delta\varepsilon)/\hbar)$ — ширина неоднородно-уширенной линии ЯМР. При этом $(\Delta(0)/k_B T_c) \approx 1.75$.

Используя вытекающую из приведенных в работе [2] численных данных оценку $U_{SN} \sim 10^5 \text{ с}^{-1}$ и полагая $(\Delta\nu) \sim 10^5 \text{ с}^{-1}$, в случае ферромагнетика получаем $T_c \sim 10^{-6} \text{ К}$, т. е. критическую температуру того же порядка, что и в случае однородно-уширенной линии ЯМР [2]. По соображениям, изложенным в работе [2], можно ожидать, что в антиферромагнетиках температура фазового перехода окажется на 1—2 порядка выше.

Список литературы

- [1] Цифринович В. И., Игнатченко В. А. // ЖЭТФ. 1986. т. 91. № 3 (9). С. 968—974.
- [2] Сафонов В. Л. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 11. С. 263—270.
- [3] Туров Е. А., Петров М. П. ЯМР в ферро- и антиферромагнетиках. М., 1969. 260 с.
- [4] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1958. V. 112. N 6. P. 1900—1916.
- [5] Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел: Пер. с англ. М., 1967. 491 с.

Институт физики АН ГССР
Тбилиси

Поступило в Редакцию
3 мая 1989 г.

УДК 538.911

Физика твердого тела, том 31, в. 12, [1989
Solid State Physics, vol. 31, № 12, 1989

О СМЕЩЕНИЯХ АТОМОВ В КРИСТАЛЛЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ТЕТРАЭДРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ

А. А. Вайполин

У твердых растворов замещения со структурой типа сфалерита, например между соединениями A^3B^5 , не обнаруживается тенденции к упорядочению. Поэтому для них естественной представляется модель структуры типа «беспорядочной сетки», когда вследствие различия длин связей замещающих друг друга атомов и статистического их чередования атомы смещены из идеальных позиций «средней» решетки и смещения случайны

¹ Предполагается, что центральное значение поля компенсации $\delta H_0 = 0$.

по величине и направлению. Методика рентгеновских измерений, ранее использовавшаяся автором [1, 2], позволяет проверить это представление при более высоком разрешении, чем в стандартном прецизионном структурном анализе. В связи с проблемой практического использования многокомпонентных полупроводниковых материалов представляет значительный интерес и другой аспект проблемы взаимодействия в кристаллах сложного состава со статистическим размещением атомов разных элементов в одной позиции, насколько известно автору, еще не рассматривавшийся. Кристалл сложного состава — это единая система остовов атомов и валентных электронов, отличие геометрии связей от идеальной зависит от состояния системы и не определяется исключительно различием тетраэдрических радиусов. Встает вопрос о возможности обнаружения и изучения эффектов, связанных с негеометрическими факторами. Для изучения целесообразно взять объект, в котором бы геометрический фактор сказывался возможно меньше. Здесь, в частности, подходит многокомпонентная фаза из элементов изоэлектронного ряда.

В данной работе исследован кристалл пятикомпонентной фазы, состав которого близок к 20%-ному раствору Cu_2GeSe_3 в арсениде галлия (сведения о получении и некоторых свойствах кристаллов приведены в [3]). Кристалл имел хорошо сформированную грань (111). Параметр элементарной ячейки $a = 5.6219 \pm 0.0005 \text{ \AA}$. Для определения характера и параметров смещений атомов по методу [1, 2] получено 50 абсолютных значений независимых экспериментальных структурных факторов в области $H^2 = h^2 + k^2 + l^2 = 147 \div 232$.

При указанном составе кристалла на элементарную ячейку приходится 8/15 атома меди, 3.2 Ga, 4/15 Ge, 3.2 As, 0.8 Se. В качестве исходной принята обычная модель структуры типа сфалерита с размещением атомов меди, галлия и германия, которые в дальнейшем будем называть атомами А, в позиции 4: (a) 000 и атомов мышьяка и селена (атомы В) в 4: (c) $1/4 \ 1/4 \ 1/4$ пр. гр. $F43m$.

Закономерные различия величин в группах структурных факторов отражений, соответствующих одному и тому же H^2 и разным hkl , являются признаком анизотропии смещений атомов из идеальной позиции. Для исследованного кристалла непосредственно прослеживалась зависимость величин структурных факторов от $h^2k^2 + h^2l^2 + k^2l^2$, чему соответствует преимущественное смещение атомов по $\langle 110 \rangle$. Поскольку нет оснований допускать сильную анизотропию тепловых колебаний, следует приписать эффект смещению позиций атомов вследствие различия у них длин связей. В кристаллографическом описании это соответствует переходу атомов из четырехкратных позиций в 48: (h) xyz со статистическим заполнением последней на $1/12$ и при $z=0$. Чтобы вызвать наблюдаемый эффект, атомы А должны быть смещены так, что $x_A = 0.022$, а атомы В — до $x_B = 1/4 + 0.020$. Однако в этом случае на смещение позиций приходится слишком большая часть суммарного среднеквадратичного смещения и константа температурного фактора оказывается чрезмерно малой, около 0.35 \AA^2 . Поэтому нужно полагать, что позиции смещены только у части атомов, скорее всего у атомов меди, германия и селена. В этом случае $x_{\text{Cu, Ge}} = 0.033 \pm 0.002$ и $x_{\text{Se}} = 0.030 + 0.001 + 1/4$. Здесь неявно допускается возможность образования доменов Cu_2GeSe_3 внутри матрицы арсенида галлия. Следует рассмотреть и другие возможные варианты, в частности с образованием доменов CuGaSe_2 . Размещение в указанных выше позициях 0.4 атома меди с 0.4 галлия и 0.8 селена в расчете на элементарную ячейку с приведенными параметрами дает те же величины структурных факторов. Вследствие малого различия рассеивающих способностей атомов в статистической структуре, когда все они принадлежат элементам одного изоэлектронного ряда, однозначное распределение атомов по позициям невозможно. Тем не менее остается основание полагать наиболее вероятным размещение в позициях 48: (h) атомов селена и 20 % атомов А. После учета смещений атомов по $\langle 110 \rangle$ сопоставление измеренных и рас-

считанных структурных факторов выявляет различия, характерные для смещений атомов преимущественно по $\langle 111 \rangle$. Такой вид анизотропии смещений наблюдается в структурах A^3B^5 при комнатной температуре и объясняется температурным изменением геометрии связей [1, 2], только смещения противоположны по направлению наблюдаемым в структурах A^3B^5 . По тем же соображениям, какими обосновывалась модель структуры A^3B^5 , можно думать, что эффект вызван переходом оставшихся несмещенными по $\langle 110 \rangle$ атомов А в позицию 16: (e) xxx. Если в позицию 48: (h) смещено 20 % атомов А, для остальных 80 %, смещенных в 16: (e), $x = -0.0070 \pm 0.0005$; температурные факторы атомов А и В в этом случае получаются практически одинаковыми, но имеют необычную особенность. Температурный фактор $\exp(-\beta H^2)$ или $\exp(-Bs^2)$, где $s = \sin \vartheta / \lambda$, учиты-

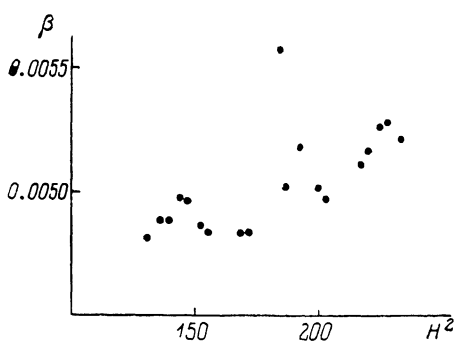


Рис. 1. Ход параметра температурного фактора кристалла пятикомпонентной фазы.

К данным по измерениям в области $H^2=147+232$ добавлены данные в области $H^2=131+144$. Точки соответствуют β , среднему по всем отражениям при одном и том же H^2 .

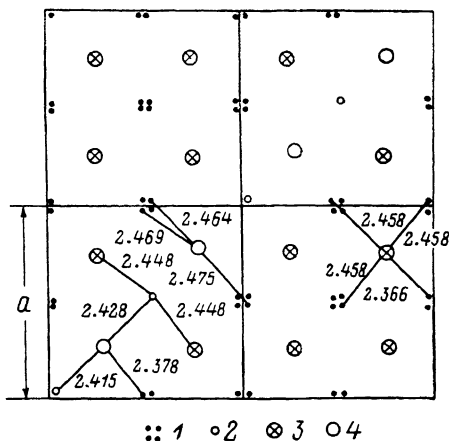


Рис. 2. Схематическое изображение проекции фрагмента структуры на (001).

1 — атомы А1 в одной из возможных позиций: 0.007 0.007 0.007, —0.007 —0.007 0.007, —0.007 0.007 —0.007, 0.007 —0.007 —0.007; 2 — атомы А2 в позиции 0.033 0.033 0; 3 — атомы В1 в позиции 1/4 1/4 1/4; 4 — атомы В2 в позиции 0.28 0.28 0.25. Числа указывают величины соответствующих межатомных расстояний в Å.

важущий смещения атомов, вызываемые тепловыми гармоническими колебаниями, определяется одним параметром — константой β или B . Когда известны абсолютные значения экспериментальных структурных факторов, общий параметр определяют, усредняя по всем отражениям $\ln(|F|_{\text{внч}}/|F|_{\text{взм}})/H^2$. В данном случае эта величина явно обнаруживает зависимость от H^2 с осциллирующим ходом (рис. 1), т. е. не является константой. Из этого следует, что распределение смещений не соответствует лишь гармоническим тепловым колебаниям, скорее всего остались неучтенными частично статические смещения атомов. Неучтенные смещения не проявляют заметной анизотропии.

В рассматриваемой структуре с формально определенными параметрам и паре атомов — ближайших соседей, когда один или оба занимают одну из близкорасположенных позиций, — соответствует целый набор возможных длин связей. Но это не значит, что все они обязательно существуют в реальной структуре. Оценив длины связей, какие могут образоваться в структуре, по суммам тетраэдрических радиусов и по реальным известным структурам GaAs, CuGaSe₂, CdGeAs₂ можно убедиться, что в изучаемой структуре длины связей не должны выходить за пределы интервала 2.35—2.55 Å. Обозначим атомы, которым выше формально приписаны позиции 16: (e) и 4: (c), соответственно как А1 и В1, а атомы в 48: (h) — как А2 и В2. В формально возможных случаях, когда атом А2 окружен че-

тырьмя В1 или атом В2 — четырьмя А1, из четырех связей одна оказывается слишком короткой и одна слишком длинной; обе выходят за пределы указанного выше интервала. Длина же связи А2—В2 попадает в этот интервал, только когда позиции обоих атомов сдвинуты параллельно и в одном направлении. Все сказанное приводит к структурной модели, где в матрицу из атомов А1 и В1 вставлены цепочки атомов —А2—В2—А2—В2— вдоль [110] или эквивалентного направления (рис. 2). Таким образом, структуре присуща значительная степень упорядочения. Кроме того, в большей или меньшей степени упорядочено взаимное расположение атомов галлия, меди и германия, но при использованной методике не может быть обнаружено. Нельзя исключить и в какой-то степени упорядочение в чередовании цепочек —А1—В1—А1—В1— и —А2—В2—А2—В2—.

Обрыв цепочек —А2—В2—А2—В2—, которые при общей статистичности структуры должны иметь неодинаковую длину и быть ориентированными по разным эквивалентным направлениям, будет приводить к появлению деформации структуры вблизи концов цепочек со сдвигами атомов. Эти смещения — наиболее вероятная причина зависимости параметра температурного фактора от H^2 .

Таким образом, в кристалле сложного состава преобладают не беспорядочные, а регулярные смещения атомов. Структура твердого раствора с гетеровалентным замещением формируется аналогично упорядоченным структурам сложных соединений, а не по принципу «беспорядочной сетки». Только особенности межатомного взаимодействия в данной многокомпонентной системе приводят к образованию конфигураций тетраэдрических связей, не характерных для структур соединений; не исключено, что это вообще свойственно многокомпонентным фазам переменного состава.

Автор выражает глубокую признательность Г. К. Аверкиевой за предоставление образца для измерений.

С п и с о к | л и т е р а т у р ы

- [1] Вайполин А. А. // Кристаллография. 1982. Т. 27. № 3. С. 608—609.
- [2] Вайполин А. А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 12. С. 3620—3623.
- [3] Аверкиева Г. К., Бердичевский Г. В., Вайполин А. А., Горюнова Н. А., Прочухан В. Д. // Изв. СССР, неорг. матер. 1968. Т. 4. № 7. С. 1064—1066.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
18 октября 1988 г.
В окончательной редакции
12 мая 1989 г.

УДК 621.315.592

Физика твердого тела, том 31, в. 12, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 12, 1989

РАССЕЯНИЕ ФОНОНОВ В ЭВТЕКТИКЕ GaSb—FeGa

Д. Г. Араслы, Р. Н. Рагимов, З. А. Джафаров,
А. А. Халилова, М. И. Алиев

В данной работе изучена теплопроводность эвтектической композиции GaSb—FeGa в интервале температур 80—300 К. Эвтектика GaSb—FeGa, полученная методом направленной кристаллизации (при сплавлении GaSb с 7.9 мас. % FeGa), состоит из полупроводниковой матрицы, содержащей металлические включения FeGa в виде направленных игл диаметром $d=1$ мкм, длиной $L=20 \div 100$ мкм и плотностью $N=3.3 \cdot 10^6$ см⁻². Концентрация дырок $p=1.2 \cdot 10^{18}$ см⁻³.