

оси ξ . (В соответствующей формуле (3) в [6] допущена небольшая неточность). В p -InSb при всех разумных частотах изменение знака постоянного поля $E_z = 60$ В/см приведет к изменению коэффициента поглощения на 10 % (при $E_0 = 0$). Интересно, что изменение знака у поперечного поля такой же величины приведет и к асимметрии порогового поля в 10 %.

Л и т е р а т у р а

- [1] *Казлаускас П.-А. В., Левинсон И. Б.* ФТТ, 1984, т. 6, № 10, с. 3192—3196.
- [2] *Блох М. Д., Магарилл Л. И., Энтин М. В.* ФТП, 1978, т. 12, № 2, с. 249—257.
- [3] *Ищенко Е. Л., Пикус Г. Е.* Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 6, с. 268—270.
- [4] *Ткаченко А. Ю., Иванов Ю. Л.* Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 6, с. 270—274.
- [5] *Чабан А. А.* Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 43, № 2, с. 74—75.
- [6] *Чабан А. А.* ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3538—3540.
- [7] *Блох М. Д., Энтин М. В.* ФТП, 1982, т. 16, № 5, с. 822—826.
- [8] *White D. L. J.* Appl. Phys., 1962, vol. 33, № 8, p. 2547—2554.
- [9] *Бир Г. Л., Пикус Г. Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
- [10] *Хилсум К., Роуз-Инс А.* Полупроводники гиа $A_{III}B_V$. М.: ИЛ, 1963. 323 с.

Поступило в Редакцию
4 марта 1987 г.
В окончательной редакции
30 апреля 1987 г.

УДК 538.69+539.124

Физика твердого тела, том 29, в. 3, 1987
Solid State Physics, vol. 29, № 3, 1987

УГЛОВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФОРМЫ ЛИНИЙ ЭПР Mn^{2+} В НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЕ КРИСТАЛЛОВ $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$

А. М. Зиятдинов, В. Г. Курявий, Р. Л. Давидович

В [1-3] установлено, что в кристаллах $MgBF_6 \cdot 6H_2O$ (B—Si, Ge) при повышении температуры наблюдается последовательность фазовых переходов: сегнетоэластическая фаза ($P2_1/c$) \leftrightarrow несоразмерная фаза \leftrightarrow параэластическая фаза ($R\bar{3}$). Однако в другом сегнетоэластике семейства $MgBF_6 \cdot 6H_2O$, в кристаллах $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$, вплоть до температур дегидратации (~ 350 К) переход в параэластическое состояние не наблюдается, хотя спектры ЭПР Mn^{2+} в этом соединении выше температуры фазового перехода из сегнетофазы ($T_c = 300$ К) и в модулированной фазе кристаллов $MgBF_6 \cdot 6H_2O$ (B—Si, Ge) качественно идентичны друг другу [3]. В настоящей работе сообщаются результаты исследований угловой зависимости форм линий сверхтонкой структуры (СТС) спектра ЭПР монокристаллов $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$, подтверждающие наличие в этом соединении выше T_c областей с модуляцией решеточных смещений (структурных солитонов) и уточняющие мотив структурной организации кристаллов выше T_c .

Синтез монокристаллов фторотитаната магния, содержащих 1 % Mn^{2+} , проводили по методике, описанной в [4]. Изучение ЭПР проводилось в X-диапазоне на радиоспектрометре ESR-231 производства АН ГДР, в интервале температур от T_c до ~ 350 К.

Выше T_c спектр ЭПР Mn^{2+} во фторотитанате магния имеет осевую симметрию с $z \parallel C_3$ (C_3 — тригональная ось роста кристаллов) и состоит из 5×6 линий СТС. При $H \parallel$ и $\perp C_3$ контуры линий СТС зависят от значения электронного квантового числа M , однако, за исключением слегка асимметричных одиночных линий центральной группы, содержат две хорошо разрешенные компоненты. При вращении образцов вокруг C_3 (по углу φ), образующей некоторый угол θ с H ($\theta \neq 90^\circ$), формы линий СТС испытывают

сложные, повторяющиеся через 120° изменения (рис. 1). Причем амплитуда этих изменений, в том числе ΔH_{12} — параметра формы линии, определенной способом указанным на рис. 1, максимальна при $\theta=60^\circ$, зна-

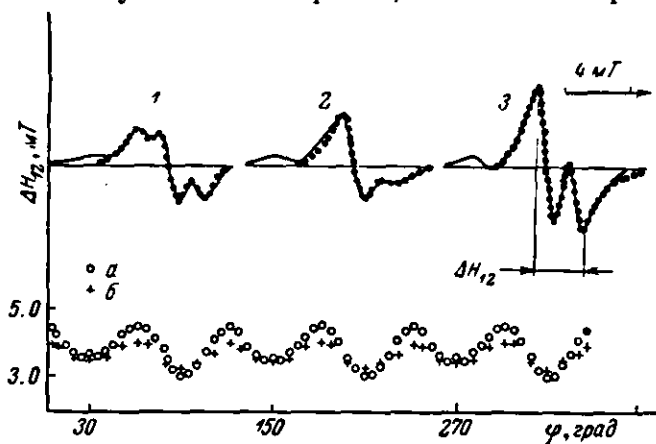


Рис. 1. Угловые зависимости формы (1, 2, 3) и величины расщепления (ΔH_{12} — кривая а) низкочастотной линии СТС спектра ЭПР $\text{MgTiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O} : \text{Mn}^{2+}$ при вращении образца вокруг оси C_2 ($\theta=50^\circ$) и сравнение (в верхней части рисунка) экспериментальной формы линии (сплошная кривая) с вычисленной (точечная кривая) для различных ориентаций.

1 — $\varphi_n=60^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$); 2 — $\varphi_n=30^\circ+120^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$) и 3 — $\varphi_n=90^\circ+120^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$). Приведенные на рис. 1 теоретические формы линий СТС получены при соответствующих значениях параметров модуляции из таблицы. Небольшой сигнал, наблюдаемый со стороны слабых полей, обусловлен запрещенным переходом с правилом отбора $\Delta m=\pm 1$. Для сравнения приведена также зависимость $\Delta H_{12}(\varphi)$ низкочастотной линии СТС Mn^{2+} в несоизмерной фазе $\text{MgSiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O} : \text{Mn}^{2+}$ (кривая б, $T=305\text{ K}$).

чении угла вблизи которого при данном φ само значение ΔH_{12} минимальное (рис. 2). Примечательной особенностью угловой зависимости форм линий от φ является появление вблизи определенных ориентаций кри-

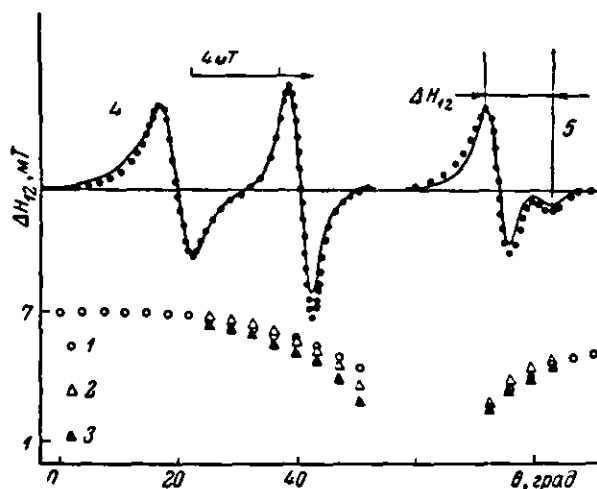


Рис. 2. Угловые зависимости формы (4, 5) и величины расщепления (ΔH_{12}) низкочастотной линии СТС спектра ЭПР $\text{MgTiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O} : \text{Mn}^{2+}$ при вращении образца в различных плоскостях, содержащих ось C_2 и сравнение (в верхней части рисунка) экспериментальной формы линии (сплошная кривая) с вычисленной (точечная кривая) для ориентаций $\Pi \parallel C_2$ (4) и $\Pi \perp C_2$ (5).

1 — $\varphi_n=60^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$); 2 — $\varphi_n=30^\circ+120^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$); 3 — $\varphi_n=90^\circ+120^\circ n$ ($n=0, 1, 2, \dots$). Приведенные на рис. 2 теоретические формы линий СТС получены при соответствующих значениях параметров модуляции из таблицы.

сталла дополнительного третьего максимума (рис. 1). Указанная форма линии повторяется в два раза чаще, чем две другие, приведенные на этом же рисунке экстремальные формы линии.

В [3] было показано, что форма линий СТС Mn^{2+} в исследуемых кристаллах при $H \parallel C_3$ и $T > T_c$ удовлетворительно описывается в рамках модели одномерных решеточных смещений, задаваемых

$$U(x) = A(x) \cos(\Phi(x) + \Phi_0) = A(x) \cos \varphi(x),$$

где $\varphi(x)$ — фаза решеточных смещений в направлении одномерной модуляции x , Φ_0 — некоторый фазовый сдвиг. $A(x) = A_0 + \Delta A(x)$ — амплитуда решеточных смещений, $\Delta A(x) \ll A_0$ и в допущении, что резонансное поле $H = H(U(x))$, можно представить в виде разложения по степеням $\cos \varphi$

$$H = H_0 + h_1(x) \cos \varphi(x) + h_2(x) \cos^2 \varphi(x) + \dots$$

где H_0 — резонансное значение поля при отсутствии модуляции, h_1 и h_2 — некоторые функции x . В настоящей работе указанная схема расчетов была использована для машинного моделирования формы линий СТС Mn^{2+} в $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$ выше T_c при различных значениях θ и φ . Форма неоднородно-уширенной резонансной линии, как и в [1, 3], определялась интегрированием произведения функции частотного распределения

$$f(H) \approx \frac{\text{const}}{|\sin \varphi [\Delta^2 + \cos^2 3\varphi]^{1/2} + C_0 \cos \varphi \sin 3\varphi \cos 3\varphi| dH/dU},$$

где C_0 — некоторый параметр, Δ связан с плотностью солитонов известным соотношением [5] $n_s = (\pi/2)/K [1/(1+\Delta^2)^{1/2}]$ на функцию формы лоренцевой линии с шириной на полувысоте ΔW .

Значения параметров несорамерной модуляции решеточных смещений, соответствующие приведенным на рис. 1 и 2 вычисленным линиям спектра ЭПР монокристаллов $MgTiF_6 \cdot 6H_2O : Mn^{2+}$ для различных θ и φ

№№	θ , град	φ_n , град	h_1 , мТ	h_2 , мТ	W , мТ	C_0	Φ_0 , рад	n_s
1	50	60 n ($n = 1, 2, 3, \dots$)	-2.30	0.135	1.04	0.4	0.0	0.36
2	50	30+120 n ($n = 1, 2, 3, \dots$)	-2.20	0.131	1.04	0.4	0.78	0.36
3	50	90+120 n ($n = 1, 2, 3, \dots$)	-1.71	0.011	1.04	0.4	0.51	0.36
4	0	0 ÷ 360	-3.80	3.50	0.98	0.4	0.0	0.36
5	90	0 ÷ 360	-2.42	0.59	0.98	0.4	0.08	0.36

Очевидно, в общем случае ΔW является функцией θ и φ . Однако с учетом качественной идентичности характера угловых зависимостей форм линий ЭПР Mn^{2+} в $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$ выше T_c и в несорамерной фазе кристаллов $MgBF_6 \cdot 6H_2O$ (В—Si, Ge) (рис. 1) и отсутствия в высокотемпературной параэластической фазе пр. гр. симметрии $R\bar{3}$ как последних двух кристаллов [1, 6], так и других изученных соединений семейства $ABF_6 \cdot 6H_2O$ [7-9] зависимости ширины и форм линий ЭПР Mn^{2+} от φ при машинном моделировании форм линий СТС Mn^{2+} в $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$ ($T > T_c$) ΔW полагалась не зависящей от φ . Результаты машинного моделирования спектров представлены в таблице и в верхней части рис. 1 и 2.

Хорошее совпадение расчетных и экспериментальных форм линий СТС при всех ориентациях кристалла относительно H достигается при постоянном для данной температуры значении $n_s < 1$. Т. е. монокристаллы $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$ выше T_c имеют неоднородное строение и состоят из двух типов областей: с модуляцией решеточных смещений (структурные солитоны) и без модуляции решеточных смещений (домены). С другой стороны, согласно [7, 10], сам факт наличия в $MgTiF_6 \cdot 6H_2O$ выше T_c угловой зависимости форм и расщеплений линий СТС аксиальных спектров ЭПР Mn^{2+} от φ с периодом повторяемости 120° следует рассматривать при ΔW .

не зависящей от φ , как свидетельство несовпадения вследствие разворотов вокруг C_3 осей кубического кристаллического поля на различных ионах Mn^{2+} . Возможность же хорошего теоретического описания наблюдаемых изменений форм линий СТС Mn^{2+} от φ в рамках введенных представлений о неоднородном строении кристаллов фторотитаната магния и с зависящими от φ значениями параметров модуляции решеточных смещений позволяет предположить, что указанная разориентация осей кубического кристаллического поля имеет место в структурном солитоне и связана с модуляцией угла разворота комплексных ионов вокруг C_3 (относительно их позиций в гипотетической парафазе пр. гр. симметрии $R\bar{3}$).

Л и т е р а т у р а

- [1] Зиятдинов А. М., Курявый В. Г., Давидович Р. Л. ФТТ, 1985, т. 27, № 7, с. 2152—2154.
- [2] Зиятдинов А. М., Курявый В. Г., Давидович Р. Л. В кн.: VIII Всесоюзный феофиловский симпозиум по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов. Тез. докл. Свердловск, 1985. 141 с.
- [3] Зиятдинов А. М., Курявый В. Г., Давидович Р. Л. ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3549—3551.
- [4] Тананасов И. В., Авдеевская К. А. ЖНХ, 1960, т. 5, № 1, с. 63—68.
- [5] Blinc R., Preloušek P., Kind R. Phys. Rev., 1983, vol. 27, N 9, p. 5407—5411.
- [6] Зиятдинов А. М., Курявый В. Г., Давидович Р. Л. ФТТ, 1987, т. 29, № 1, с. 215—218.
- [7] Зарипов М. М., Зиятдинов А. М., Яблоков Ю. В., Давидович Р. Л., Левчишина Г. Ф. ФТТ, 1975, т. 17, № 4, с. 1164—1166.
- [8] Bleaney B., Ingram D. J. Proc. Roy. Soc., 1951, vol. 205, p. 336—347.
- [9] Jayaram G., Sastry S. G. Chem. Phys. Lett., 1983, vol. 97, N 4—5, p. 431—434.
- [10] Mialhe P., Brignet A., Erbeia A. Sol. St. Commun., 1971, vol. 9, N 7, p. 755—757.

Институт химии АН СССР
Дальневосточный научный центр
Владивосток

Поступило в Редакцию
25 декабря 1986 г.
В окончательной редакции
4 мая 1987 г.

УДК 621.315.592

Физика твердого тела, т. 29, в. 19, 1987
Solid State Physics, vol. 29, no. 19, 1987

О МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

О. А. Голикова

Вопросам моделирования структуры аморфных полупроводников уделяется значительное внимание, обусловленное все возрастающим интересом к физике этих веществ. Этой же причиной вызван интерес к исследованиям кристаллов с искусственно созданным «беспорядком» структуры: сильно легированных и подвергнутых радиационным воздействиям, фаз переменного состава с нестехиометрическими дефектами, а также пленок, имеющих микрокристаллитную структуру [1—5].

Цель данного сообщения — показать, что особенности кристаллического строения модификаций бора (кроме α -ромбоэдрической) и высокобористых соединений (свыше 90 ат. % В) позволяют определить эти вещества как естественные структурные модели аморфного полупроводника.

Кристаллические решетки этих веществ строятся на основе икосаэдров B_{12} , рис. 1, образование которых необходимо для существования прочных ковалентных связей ($t_{1/2} \geq 2000$ °C), несмотря на наличие у атома бора только трех валентных электронов. Однако среди элементов симметрии икосаэдра имеется ось вращения пятого порядка, и это делает