

РЕЛАКСАЦИЯ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ В КРИСТАЛЛЕ BaF₂: Cu

Офицерова Н.Ю.¹, Сарычев М.Н.¹, Жевстовских И.В.^{1,2}, Суриков В.Т.³,
Уланов В.А.⁴, Аверкиев Н.С.⁵, Гудков В.В.¹

- ¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
- ²⁾ Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
- ³⁾ Институт химии твёрдого тела Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
- ⁴⁾ Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук, Казань, Россия
- ⁵⁾ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: n.ofitserova@mail.ru

RELAXATION OF THE JAHN-TELLER SUBSYSTEM IN BaF₂: Cu CRYSTAL

Ofitserova N.Yu.¹, Sarychev M.N.¹, Zhevstovskikh I. V.^{1,2}, Surikov V.T.³, Ulanov
V.A.⁴, Averkiev N.S.⁵, Gudkov V.V.¹

- ¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia
- ²⁾ M. N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
- ³⁾ Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
- ⁴⁾ E. K. Zavoisky Physical Technical Institute, FRC Kazan Scientific Centre of Russian Academy of Sciences, Kazan, Russia
- ⁵⁾ A. F. Ioffe Physical Technical Institute of Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia

The work studies the Jahn-Teller subsystem quantum dynamics in BaF₂: Cu crystal by ultrasonic method. Temperature dependence of the relaxation time was constructed. Three relaxation mechanisms: thermal activation, tunneling through the potential energy barrier, two-phonon mechanism were revealed.

Кристаллы, легированные ионами переходных металлов, находят применение в квантовой оптике, спинтронике, вычислительной технике, что определяет интерес к изучению их фундаментальных свойств. В случае орбитального вырождения основного состояния примесного иона наблюдается эффект Яна-Теллера (ЯТ), в результате которого понижается локальная симметрия ЯТ комплекса, т.е. ЯТ иона и его ближайшего окружения. Наряду с традиционными, оптическими и магниторезонансными, методами исследования ЯТ комплексов в кристаллах, в последние годы применяется ультразвуковой

метод, который позволяет получать новую информацию об основном состоянии ЯТ комплекса. Установление механизмов релаксации ЯТ подсистемы из температурной зависимости времени релаксации представляет особый интерес, так как при этом могут быть получены параметры, определяющие квантовую динамику ЯТ подсистем, что является основой для сравнения ЯТ комплексов в различных кристаллических решетках.

Работа нацелена на изучение динамических свойств ян-теллеровских центров в кристалле $\text{BaF}_2:\text{Cu}$. Исследования выполнены методами физической акустики: на различных частотах от 18 до 268 МГц в интервале 4-150 К получены температурные зависимости скорости и поглощения ультразвука. ЯТ комплекс в $\text{BaF}_2:\text{Cu}$ представляет собой ион Cu^{2+} , изовалентно замещающий Ba^{2+} в решетке и находящийся в кубическом окружении восьми ионов F^- , описывается в рамках $T \otimes (e+t_2)$ задачи эффекта Яна-Теллера и имеет адиабатический потенциал, заданный в пятимерном пространстве тригональных и тетрагональных симметризованных координат. Обнаруженные аномалии на действительной и мнимой составляющих упругого модуля c_{44} в $\text{BaF}_2:\text{Cu}$, характеризующие релаксационный вклад ЯТ центров, оказались на два порядка меньше, чем в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}$ с подобным значением концентрации меди [1]. Такое различие может быть связано с тем, что в $\text{BaF}_2:\text{Cu}$ лишь малая часть примеси изовалентно замещает ионы Ba, остальные ионы Cu, согласно данным ЭПР, могут занимать смещенные от центра вдоль осей $\langle 001 \rangle$ положения, и не являться ян-теллеровскими [2].

В результате обработки данных о мнимой составляющей упругого модуля была построена температурная зависимость времени релаксации. Модельная кривая, полученная с учетом трех механизмов релаксации: туннельного, двухфононного и термической активации, хорошо совпадает с экспериментальной кривой. В результате моделирования времени релаксации определены значения нескольких параметров, один из которых - энергия активации, характеризует высоту потенциального барьера и позволяет сравнивать ЯТ примеси в различных кристаллах. Построение температурной зависимости времени релаксации и установление механизмов, ее определяющих, не требует данных о концентрации ЯТ ионов.

1. Сарычев, М. Н. Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов $\text{Cu}(2+)\text{F}(-)8$ в кристалле флюорита / М. Н. Сарычев, У. А. Л. Хоссени, И. В. Жевстовских, В. А. Уланов, А. В. Егранов, В. Т. Суриков, Н. С. Аверкиев, В. В. Гудков // ЖЭТФ. – 2022. – 162. – С. 509–521.
2. Зарипов М.М., Уланов В.А. // Физика твердого тела – 1989. - Т. 31. - № 10. – С. 254-256.