Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 2, с. 87 – 93

Определение позиций примесных центров в ядре дислокации в кристалле NaCl из спектров магнитопластичности

В. И. Альшиц[1], *М. В. Колдаева, Е. А. Петржик, А. Ю. Белов, Е. В. Даринская*

Институт кристаллографии им. Шубникова РАН, 119333 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 декабря 2013 г.

Изучены спектры пробегов $l(\nu)$ краевых дислокаций в кристаллах NaCl при их экспозиции в схеме электронного парамагнитного резонанса в скрещенных магнитных полях: поле Земли (50 мкТл) и поле накачки (2.5 мкТл, 5–440 кГц). Спектры измерены для серии углов $\theta = 0^\circ - 5^\circ$ поворота образца вокруг его ребра [100] относительно поля Земли. Тонкая структура спектров содержит серию пиков, резонансные частоты которых описываются эмпирической зависимостью $\nu_i^{\pm} = A\sin(\theta \pm \Delta\theta_i) \approx A(\theta \pm \Delta\theta_i)$. В пределах погрешностей эксперимента параметры $\Delta\theta_i$ от угла θ не зависят. В рамках используемой модели "замороженных" магнитных моментов, связанных с примесным центром Ca^+–Cl^0, углы $\Delta\theta_i$ характеризуют отклонение оси центра от направления $\langle 100\rangle$ в ядре дислокации. Полученные спектры позволяют найти эти углы: $\Delta\theta_i = (\nu_i^+ - \nu_i^-)/2A$. Компьютерное моделирование ядра краевой дислокации дает набор углов $\Delta\theta_i$, близких к измеренным значениям. По низкочастотному краю спектра $l(\nu)$ получена оценка времени спин-решеточной релаксации центра на дислокации: $\tau_{s-l} \sim 10^{-4}$ с.

DOI: 10.7868/S0370274X14020052

Кристаллы NaCl давно стали удобным модельным объектом для экспериментального исследования магнитопластического эффекта (МПЭ). Само это явление было обнаружено [1] как перемещение дислокаций в образце при его экспозиции в постоянном магнитном поле. В кристаллах NaCl впервые наблюдался [2] резонансный МПЭ при обработке образца в схеме электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), т.е. в скрещенных магнитных полях, постоянном и переменном (на частоте ~ 10 ГГц). Наконец, именно на кристаллах NaCl аналогичный резонансный МПЭ был позднее получен [3, 4] в магнитном поле Земли при частоте накачки ~ 1 МГц.

Конечно, это явление существует и во многих других немагнитных кристаллах самых разнообразных типов (см. обзоры [5–8]). Однако именно в кристаллах NaCl оно исследовано наиболее широко. В основе эффекта лежит магнитное преобразование структуры центров пиннинга на дислокациях с изменением силы их закрепления. Преобразованию предшествует магнитоиндуцированный спиновый переход в примесном центре, снимающий квантовый запрет на определенный электронный переход в системе. После трансформации открепление и движение дислокации происходят под действием внутренних напряжений. Аналогичные спин-зависимые явления [9] хорошо известны в химических реакциях [10, 11], фотопроводимости полупроводников [12, 13] и т. д.

До последнего времени исследования в области магнитопластичности в основном были направлены на расширение круга материалов, механические свойства которых чувствительны к магнитным воздействиям, а также на углубление понимания физических механизмов явления. В настоящей работе мы впервые пытаемся применить МПЭ в качестве инструмента для получения новой информации о самой системе дислокация–примесный комплекс. Нас будут интересовать как структурные, так и спиновые ее характеристики. В работе используется упомянутый выше резонансный МПЭ все в том же модельном кристалле NaCl в магнитном поле Земли.

Пользуясь зависимостью частоты этого резонанса от ориентации образца в магнитном поле Земли, мы перейдем к ранее не исследованной области низких частот, 5–440 кГц. Это позволит, во-первых, найти порог исследуемого резонанса по частоте и оценить время спин-решеточной релаксации в нашей системе. Во-вторых, анализируя тонкую структуру спектров дислокационных пробегов $l(\nu)$, мы установим соответствие между пиками в спектре и положениями центров пиннинга в ядре дислокации.

В экспериментах использовались отожженные кристаллы NaCl, выращенные в ЛОМО, с концентрацией примеси (преимущественно Ca), не превышающей 10 ppm. Образцы с примерными размерами

[1] e-mail: alshits@ns.crys.ras.ru

$3\times3\times5$ мм^3 выкалывались по плоскостям спайности $\{100\}$. Перед экспериментом в них вводились свежие дислокации с плотностью $\rho_{\rm fr}\sim10^4$ см$^{-2}$ того же порядка, что и плотность $\rho_{\rm old}$ состаренных дислокаций.

Положения дислокаций до и после магнитной экспозиции фиксировались методом химического травления. Изучалось движение краевых дислокаций. Их средний пробег l находился из гистограмм пробегов. Мы будем использовать безразмерный пробег $l\sqrt{\rho}$ – отношение l к среднему расстоянию $1/\sqrt{\rho}$ между дислокациями ($\rho=\rho_{\rm fr}+\rho_{\rm old}$). По нашим данным дислокации являлись в основном прямолинейными с ориентацией $\langle100\rangle$ и плоскостями скольжения $\{110\}$.

Магнитное поле Земли $\mathbf{B}_{\rm Earth}$, измеренное в месте нахождения образца, составляло угол 29.5° с вертикалью и равнялось 49.97 мкТл. Поле накачки $\tilde{\mathbf{B}}\perp\mathbf{B}_{\rm Earth}$ создавалось в коаксиальной экранированной камере вокруг медного стержня, по которому пропускался синусоидальный ток, обеспечивающий амплитуду $\tilde{B}_m=2.5$ мкТл. Частота этого поля варьировалась в интервале $\nu=(5-440)$ кГц. Образец устанавливался так, чтобы его грань (100) совпадала с плоскостью полей $\{\mathbf{B}_{\rm Earth},\tilde{\mathbf{B}}\}$, а угол θ между ребром [001] и полем Земли регулировался поворотами вокруг ребра [100] (подробнее см. [4]). Здесь мы следили только за дислокациями [100], выходящими на грани (100) (рис. 1). Время магнитной обработки

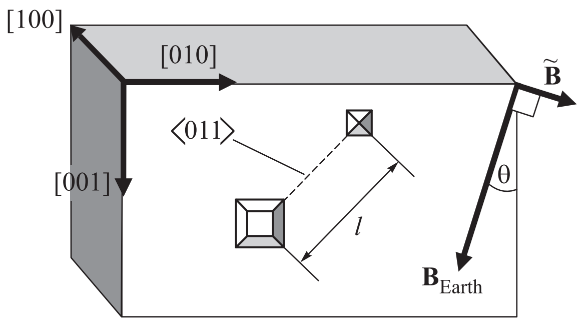

Рис. 1. Схематическое изображение образца в скрещенных магнитных полях $\mathbf{B}_{\rm Earth}$ и $\tilde{\mathbf{B}}$. Показаны ямки травления краевой дислокации ($\mathbf{L}\|[100]$), отмечающие ее начальное и конечное положения при перемещении l в плоскости скольжения (011)

образцов во всех экспериментах составляло 5 мин.

В работе [3], в которой был впервые продемонстрирован дислокационный ЭПР в магнитном поле Земли, была обнаружена связь резонансной частоты пика пробегов $l(\nu)$ с углом θ между образцом и полем $\mathbf{B}_{\rm Earth}$. Она описывалась эмпирической формулой

$$\nu_r=\nu_0\cos\theta_{1,2},\quad \nu_0=g\mu_{\rm B}B_{\rm Earth}/h. \tag{1}$$

Здесь $\theta_1=\theta$, $\theta_2=90°-\theta$, $g\approx2$ – фактор Ланде, $\mu_{\rm B}$ – магнетон Бора, h – постоянная Планка, а величина ν_0 совпадает с частотой классического ЭПР. Появление дополнительного косинуса в правой части (1) (так называемая анизотропия g-фактора) интерпретируется в [3] в рамках модели "замороженных" моментов $\mathbf{M}_{1,2}$ примесных центров пиннинга – магнитоактивных "гантелей" $\mathrm{Ca^+{-}Cl^0}$. Моменты $\mathbf{M}_{1,2}$, образованные парами спинов этих центров, считаются ориентированными вдоль осей гантелей (рис. 2). Взаимодействие таких моментов с полем Земли и зе-

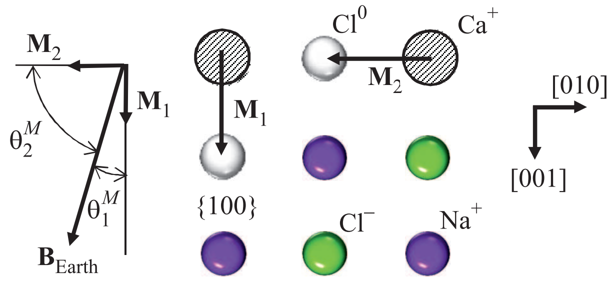

Рис. 2. Моменты $\mathbf{M}_{1,2}$ в плоскости $\{100\}$, связанные с комплексом $\mathrm{Ca^+-Cl^0}$, и их ориентация относительно $\mathbf{B}_{\rm Earth}$

емановское расщепление должны быть пропорциональны $\cos\theta^M_{1,2}$, где $\theta^M_{1,2}=\angle(\mathbf{M}_{1,2},\mathbf{B}_{\rm Earth})$. В формуле (1) предполагается, что речь идет о моментах, ортогональных дислокации и направленных параллельно ребрам образцов $\langle100\rangle$, т.е. $\theta_{1,2}\approx\theta^M_{1,2}$.

В обсуждаемой модели при любой установке образца должны существовать два резонанса с частотами, пропорциональными $\cos\theta_{1,2}$. Такие два пика были получены [3] при $\theta_1=\theta=22.5°$ и $\theta_2=67.5°$ в поле Земли $B_{\rm Earth}\approx117$ мкТл. В [4] к ним были добавлены пики при $\theta_1=0°$, 30°, 45° и $\theta_2=60°$, снятые для кристаллов другого происхождения при другом поле $B_{\rm Earth}\approx50$ мкТл. Тем не менее общая зависимость (1), $\nu_r/\nu_0=\cos\theta_{1,2}$ хорошо описывает все шесть относительных частот, измеренных в [3, 4]. На рис. 3а из этих данных оставлены только точки, относящиеся к исследуемому кристаллу $\mathrm{NaCl_{LOMO}}$. К ним добавлена точка, отвечающая приведенному ниже низкочастотному пику (75 кГц) при $\theta_2=85°$ (см. штриховой максимум на рис. 5а). Судя по рис. 3а, эксперимент дает неплохое согласие с формулой (1).

Впрочем, из того же рисунка видно, что по мере понижения резонансных частот $\nu_r(\theta_i)$ относительные отклонения экспериментальных точек от косинусоиды $\cos\theta_i$ увеличиваются. Это особенно заметно по

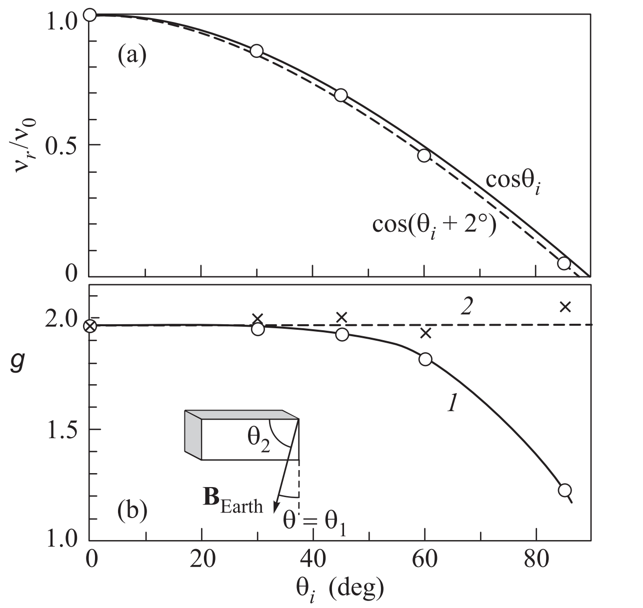

Рис. 3. Зависимости относительной частоты резонанса (a) и g-фактора (b) от углов $\theta_{1,2}$ ($\theta_1 < 45°$, $\theta_2 > 45°$); $\nu_0 = \nu(0) = 1.38$ МГц. На рис. a сплошная линия – график косинусоиды, штриховая – та же косинусоида, сдвинутая влево на 2°. На вставке – схема ориентации образца относительно $\mathbf{B}_{\mathrm{Earth}}$. На рис. b кружки и линия *1* – экспериментальные точки, перестроенные по формуле (2), а крестики и линия *2* – то же при замене в знаменателе (2) $\theta_i \to \theta_i + 2°$

резкому падению в данной области частот вытекающего из (1) значения g-фактора (линия *1* на рис. 3b):

$$g = \frac{h\nu_r(\theta_i)}{\mu_{\mathrm{B}} B_{\mathrm{Earth}} \cos\theta_i}, \qquad (2)$$

от исходного уровня $g \approx 2$, сохраняющегося в большей части диапазона углов θ_i (рис. 3b).

Таким образом, при больших углах θ_2, когда величина $\cos\theta_2$ сильно уменьшается, формула (1) нуждается в коррективах. На эмпирическом уровне коррекция обеспечивается заменой $\theta_i \to \theta_i + \Delta\theta$, где $\Delta\theta \approx 2°$. Действительно, как видно из рис. 3a и b, такая замена практически полностью ликвидирует обнаруженную низкочастотную "аномалию".

Физическая сущность поправки $\Delta\theta$ довольно очевидна. Не следует забывать, что углы $\theta^M_{1,2}$, которые по смыслу модели должны стоять в (1), не вполне тождественны углам $\theta_{1,2}$ из-за кривизны решетки вблизи дислокации. Именно разница между ними определяет величину $\Delta\theta$. Следует, однако, иметь в виду, что данной резонансной позиции $\theta_i + \Delta\theta$ примесной гантели в одной из систем скольжения, скажем (011), должна сопутствовать зеркально-симметричная относительно (010) картина для дислокации, скользящей в плоскости $(01\bar{1})$, когда соответствующий момент $\mathbf{M}_\alpha$ отклоняется от ребра [001] на тот же угол $\Delta\theta$, но в другую сторону (рис. 4). Это

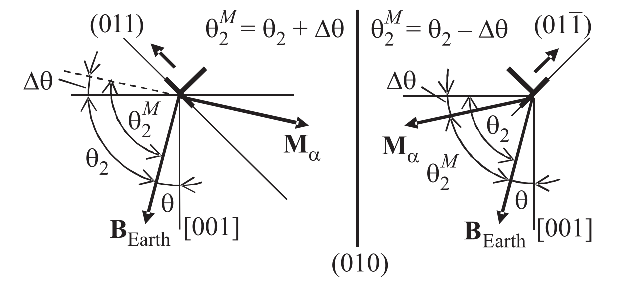

Рис. 4. Разные ориентации $\theta_2 \pm \Delta\theta$ по отношению к магнитному полю Земли $\mathbf{B}_{\mathrm{Earth}}$ двух симметрийно эквивалентных магнитных моментов $\mathbf{M}_\alpha$ примесных центров в ядрах дислокаций при их перемещении в плоскостях скольжения (011) и $(01\bar{1})$

предсказывает по меньшей мере один дополнительный пик, отвечающий углу $\theta_i^M = \theta_i - \Delta\theta$. Конечно, в ядре дислокации может иметься несколько позиций для гантели Ca^+–Cl^0, характеризуемых разными углами $\Delta\theta_\alpha$. Каждой из них должны отвечать два пика пробегов с резонансными частотами, даваемыми формулой (1) с заменой $\theta_i \to \theta_i \pm \Delta\theta_\alpha$.

Для проверки данного предположения были сняты спектры пробегов $l(\nu)$ в расширенном частотном диапазоне для трех ориентаций кристалла, $\theta = 5°$, 4° и 2.5°, отвечающих углам $\theta_2 = 85°$, 86° и 87.5° (рис. 5). Полученные спектры имеют по четыре пика. Это указывает на наличие двух ориентаций для примесной гантели Ca^+–Cl^0 в ядре дислокации, отклоненных от направления $\langle 100\rangle$ на углы $\Delta\theta_{1,2}$. В обсуждаемой модели резонансные частоты $\nu^\pm_{r1,2}$ четырех пиков на рис. 5a–c должны описываться формулой

$$\nu^\pm_{r\alpha} = \nu_0 \sin|90° - \theta_2 \pm \Delta\theta_\alpha| \approx A|\theta \pm \Delta\theta_\alpha|, \qquad (3)$$

где $A = \pi\nu_0/180° \approx 24.05$ кГц/град. Здесь мы воспользовались равенством $90° - \theta_2 = \theta$ и малостью аргумента синуса в радианной мере. Из (3) вытекают формулы

$$\Delta\theta_\alpha \approx \frac{\nu^+_{r\alpha} - \nu^-_{r\alpha}}{2A}, \qquad \tilde{\theta}_\alpha \approx \frac{\nu^+_{r\alpha} + \nu^-_{r\alpha}}{2A}, \qquad (4)$$

справедливые при $\theta > \Delta\theta_\alpha$. В (4) $\tilde{\theta}_\alpha$ означает восстановленное значение угла θ для пары пиков с частотами $\nu^\pm_{r\alpha}$. Значения углов $\Delta\theta_{1,2}$ и $\tilde{\theta}_\alpha$, найденные из формул (4), приведены в табл. 1. Видно, что разброс углов θ_α невелик, а их средние значения

$$\overline{\Delta\theta_1} = 0.90°, \quad \overline{\Delta\theta_2} = 2.63°. \qquad (5)$$

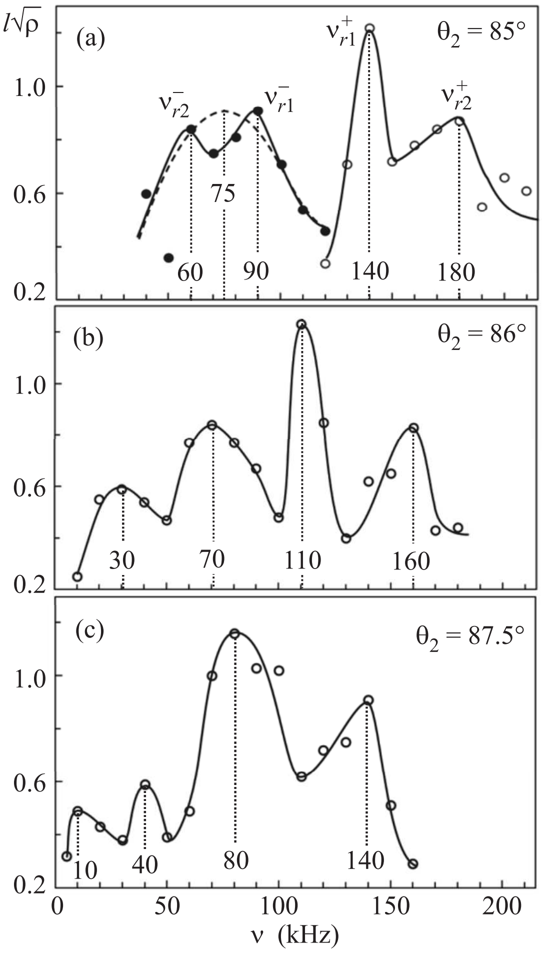

Рис. 5. Спектры пробегов дислокаций для углов $\theta_2 = 85°$ (a), $86°$ (b) и $87.5°$(c). На рис. a темными точками и штриховой кривой выделен пик, резонансная частота (75 кГц) которого использовалась на рис. 3 при $\theta_2 = 85°$. Пунктирными линиями показаны резонансные частоты $\nu_{r1,2}^{\pm}$

Погрешность установки образца $\delta\theta_\alpha = |\theta - \tilde{\theta}_\alpha|$ мала: в среднем $\overline{\delta\theta} \approx 0.2°$. Это задает погрешность измерения резонансных частот $\overline{\delta\nu} \approx A\overline{\delta\theta} \approx 5$ кГц, что примерно соответствует статистическому разбросу.

Таблица 1

Углы поворота образца θ, их восстановленные значения $\tilde{\theta}_\alpha$ и углы отклонения моментов $\Delta\theta_\alpha$ применительно к спектрам на рис. 5

θ	$\tilde{\theta}_1$	$\tilde{\theta}_2$	$\Delta\theta_1$	$\Delta\theta_2$
5°	4.78°	4.99°	1.04°	2.49°
4°	3.74°	3.95°	0.83°	2.70°
2.5°	2.50°	3.12°	0.83°	2.70°
Средние значения $\overline{\Delta\theta_{1,2}}$			0.90°	2.63°

Еще один вывод, вытекающий из спектров рис. 5, представляется принципиально важным. Речь идет о деградации резонансных пиков по мере понижения частоты. Условием наблюдаемости ЭПР является требование $\nu\tau_{s-l} \gg 1$. По косвенным данным время спин-решеточной релаксации в нашей системе ранее было оценено [5, 8] как $\tau_{s-l} \sim (10^{-4}–10^{-3})$ с. Это значит, что в области частот $\nu \sim 10$ кГц уже можно ожидать существенной деградации резонансного МПЭ и по амплитуде пиков, и по их уширению. Видимо, ее мы и наблюдаем на низкочастотных пиках на рис. 5. Фактически рис. 5 дает первое прямое экспериментальное подтверждение приведенной выше оценки и даже ее уточнение: $\tau_{s-l} \sim 10^{-4}$ с.

Возвращаясь к извлеченным из эксперимента данным об ориентациях (5) примесных гантелей $Ca^+–Cl^0$, мы сравним эти данные со структурой ядра краевой дислокации в кристалле NaCl, которая была специально получена нами путем компьютерного расчета. При этом энергия системы описывалась с помощью многочастичного потенциала [14]:

$$E = \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j\neq i} \left[V_{ij}^P(r_{ij}) + q_i q_j V_{ij}^E(r_{ij})\right]. \qquad (6)$$

Здесь $V_{ij}^{P,E}$ – парные потенциалы, зависящие от межатомного расстояния r_{ij}, а многочастичные эффекты учитываются за счет динамических зарядов ионов:

$$q_i = \sum_{k\neq i} \eta_{ki}(r_{ik}), \qquad (7)$$

возникающих вследствие описываемого функциями $\eta_{ki}(r_{ik})$ перехода заряда от одного атома (k) к другому (i). В рамках модели (6) эффективный заряд ионов Na и Cl не является постоянным, а зависит от количества и расположения окружающих их ионов.

Для определения равновесных положений атомов в ядре дислокации полная энергия (6) минимизировалась методом молекулярной динамики с периодическим обнулением скоростей атомов. Начальные координаты атомов задавались с помощью поля смещений краевой дислокации, расположенной вдоль оси симметрии 4-го порядка в бесконечной упругоанизотропной среде [15]. Минимизация проводилась для атомного блока с размерами $16b \times 22b$ (где b – величина вектора Бюргерса) вдоль направлений [011] и $[01\bar{1}]$. За его пределами положения всех атомов были фиксированы в соответствии с континуальным полем смещений [15], поскольку благодаря наличию центра симметрии локальная деформация элементарной ячейки не вызывает дополнительного смещения подрешеток Na и Cl. Вдоль линии дислокации [100] были

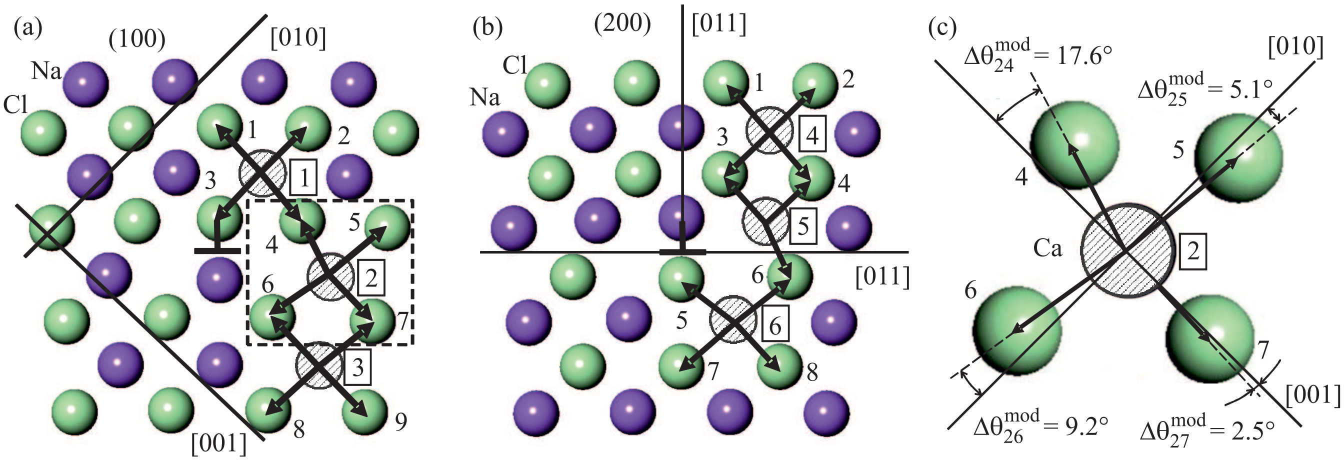

Рис. 6. Возможные позиции Ca $\boxed{i}$ (выделены штриховкой; $i = 1, ..., 6$) и ориентации гантели Ca^{+}–Cl^{0} ($\boxed{i}-j$, $j = 1, ..., 9$) в ядре краевой дислокации в кристалле NaCl. Показаны атомные плоскости (001) (a) и (002) (b), а также углы $\Delta\theta_{ij}^{\mathrm{mod}}$ (c) из табл. 2, относящиеся к области внутри штриховой границы на рис. a

наложены периодические граничные условия с периодом $3a$, где a – равновесное значение параметра решетки для потенциала (6). После минимизации абсолютная величина силы, действующей на каждый атом, не превышала 10^{-8} эВ/Å.

Результаты расчета представлены на рис. 6 в виде схематического расположения атомов вокруг линии дислокации в двух последовательных плоскостях: (100) (a) и (200) (b). При моделировании структуры не учитывалось присутствие примеси Ca. На рис. 6 просто рассмотрен ряд альтернативных позиций для гантелей Ca^{+}–Cl^{0} в структуре ядра без учета подвижек атомов вокруг нового дефекта. Пренебрежение искажениями решетки, связанными с замещением иона Na^{+} на Ca^{+}, возможно, не столь критично из-за близости их ионных радиусов. Более серьезных погрешностей можно ожидать от игнорирования замены иона Cl^{-} на нейтральный атом Cl^{0} и стоящую рядом отрицательную вакансию $V_{Na^{+}}$. Тем не менее найденная структура, по-видимому, годится для полукачественного сравнения с экспериментальными данными.

В табл. 2 представлены абсолютные значения расчетных углов $\Delta\theta_{\alpha}^{\mathrm{mod}}$ отклонения моментов $\mathbf{M}_{\alpha}$ (см. рис. 6c) от ближайших кристаллографических направлений $\langle 100\rangle$ в совершенном кристалле. Соответствие между векторами $\mathbf{M}_{\alpha}$ на рисунке и их ориентациями $\Delta\theta_{\alpha}^{\mathrm{mod}}$ в таблице определяется двухиндексным номером $\alpha = ij$, где первый индекс есть номер примесного атома Ca, а второй – номер атома Cl в соответствующей группе вокруг Ca.

Как и ожидалось, преобладающее число позиций примесного центра пиннинга в ядре дислокации (13 из 23) характеризуется малыми отклонениями $\Delta\theta_{\alpha}^{\mathrm{mod}}$ оси гантели от направлений $\langle 100\rangle$. Шесть из них дают самые малые углы: 0.6° (в табл. 2 $\alpha = 39, 43$), 0.8° (36) и 1.0° (12, 42, 68), и семь позиций – вторую группу отклонений 1.8° (41), 1.9° (11, 13), 2.5° (27), 2.8° (54), 2.9° (67) и 3.2° (38). Их средние значения:

$$\overline{\Delta\theta_{1}^{\mathrm{mod}}} \approx 0.83°, \quad \overline{\Delta\theta_{2}^{\mathrm{mod}}} \approx 2.43° \tag{8}$$

близки к соответствующим средним углам (5), найденным из эксперимента.

Для поиска аналогичных резонансов при других позициях примеси в ядре дислокации, присутствующих в табл. 2 и отвечающих большим углам отклонения $\Delta\theta_{\alpha}^{\mathrm{mod}}$, нами был измерен спектр дислокационных пробегов в расширенном интервале частот, 5–440 кГц, при наименее трудоемкой ориентации кристалла $\theta = 0$. В этом случае формула (3) дает для каждой ориентации $\Delta\theta_{\alpha}$ не два пика, а один:

$$\nu_{r\alpha} \approx A \mid \pm\Delta\theta_{\alpha} \mid = A\Delta\theta_{\alpha}. \tag{9}$$

Таблица 2

Абсолютные значения расчетных углов $\Delta\theta_{\alpha}^{\mathrm{mod}}$ отклонения моментов $\mathbf{M}_{\alpha}$ от ближайших направлений $\langle 100\rangle$ в идеальной решетке NaCl

$j \setminus \boxed{i}$	$\boxed{1}$	$\boxed{2}$	$\boxed{3}$	$\boxed{4}$	$\boxed{5}$	$\boxed{6}$
1	1.9°			1.8°		
2	1.0°			1.0°		
3	1.9°			0.6°	3.9°	
4	5.7°	17.6°		4.0°	2.8°	
5		5.1°				8.0°
6		9.2°	0.8°		21.3°	8.0°
7		2.5°	6.0°			2.9°
8			3.2°			1.0°
9			0.6°			

Следовательно, пробеги двух симметричных дислокаций на рис. 4, которые обычно дают вклады в разные пики, при $\theta = 0$ должны реагировать резонансным образом при одной и той же частоте. Увеличение числа движущихся дислокаций не только пропорционально увеличивает наполнение гистограмм пробегов и, соответственно уменьшает число экспериментов. Оно также должно углублять релаксацию дислокационной структуры, а значит, и увеличивать средний пробег, т.е. высоту пика. Все эти преимущества геометрии $\theta = 0$ реализуются в эксперименте.

Измеренный спектр дислокационных пробегов приведен на рис. 7. Как и ожидалось, первые два

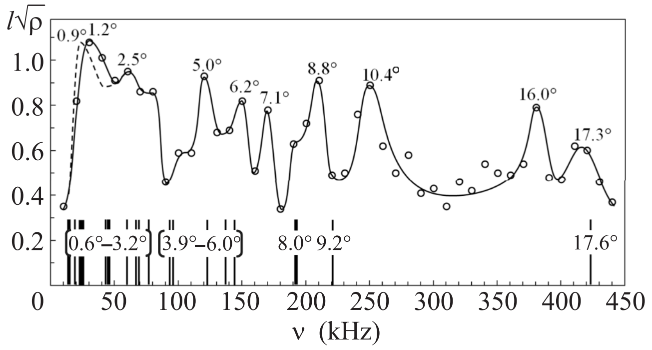

Рис. 7. Спектр пробегов дислокаций для ориентации $\theta_2 = 90°(\theta = 0)$. Углы $\Delta\theta_\alpha$ у вершин пиков найдены по формуле (9). Нижние вертикальные линии соответствуют углам из табл.2, пересчитанным в частоты согласно (9). Толщина линий отражает количество повторений угла в табл. 2 (1, 2 или 3 раза). Штриховой кривой показано положение первого пика по среднему значению (5)

пика заметно выше по амплитуде, чем аналогичные максимумы (см. рис. 5) от тех же центров, изучавшиеся при $\theta \neq 0$ в той же области частот. Сама замена на рис. 7 четырех пиков на два подтверждает формулу (9). К сожалению, для первого из них погрешность в установке кристалла в несколько десятых градуса оказывается существенной. Действительно, (9) дает для него завышенное значение угла $\Delta\theta_1 = 1.2°$, превышающее соответствующие средние значения в (5) и (8) на $0.3-0.4°$. Правильное положение пика, отвечающее более точным измерениям (см. табл. 1), показано штриховой линией. Конечно, для следующих пиков, отвечающих существенно бóльшим углам $\Delta\theta$, такая погрешность перестает быть критичной. Уже второй пик характеризуется углом $\Delta\theta_2 = 2.5°$, достаточно близким к средним значениям в (5) и (8).

Для сравнения измеренного спектра пробегов с данными табл. 2 последние были пересчитаны с помощью (9) на частоты. Они изображены внизу рис. 7 в виде "спектральных линий". Первые 13 линий образуют две группы, находящиеся как раз под первой парой пиков. Они вполне могли бы быть неразрешенными составляющими последних. Остальные измеренные пики тоже удовлетворительно согласуются с данными табл. 2. Часть из расчетных спектральных линий почти точно совпадает с измеренными резонансными частотами. Следует отметить, что большинство пиков в этой области формируется относительно небольшим числом подвижных дислокаций в кристалле. Другая корреляция состоит в существовании широкого интервала частот, в котором резонанс отсутствует (измеренный интервал составляет 250–380 кГц, расчетный оказывается несколько шире: 220–420 кГц). Конечно, для более надежного сравнения экспериментальных спектров со структурными данными потребуются как уточнение самих спектров, так и более прецизионное моделирование структуры с учетом самодействия точечных дефектов в ядре дислокации.

На данном этапе, по-видимому, можно резюмировать, что модель [3] замороженных магнитных моментов не только снимает наблюдаемые низкочастотные парадоксы МПЭ (см. рис. 3), но и открывает новые возможности использования этого эффекта для изучения тонких структурных особенностей наносистемы дислокация–парамагнитная примесь. Чувствительность частоты дислокационного ЭПР к ориентации этих моментов, а значит, и к ориентации примесных гантелей позволяет связать пики в спектре дислокационных пробегов $l(\nu)$ с типом вхождения примеси в ядро дислокации. В принципе путем выбора частоты в схеме низкочастотного ЭПР можно избирательно трансформировать в ядрах дислокаций примеси конкретного структурного типа.

Авторы благодарны Е.А.Степанцову и Ю.М.Иванову за помощь в работе. Работа поддержана грантами РФФИ (# 13-02-00341) и Президиума РАН (программа фундаментальных исследований # 24).

1. В. И. Альшиц, Е. В. Даринская, Т. М. Перекалина, А. А. Урусовская, ФТТ **29**, 467 (1987).
2. Ю. И. Головин, Р. Б. Моргунов, В. Е. Иванов, С. Е. Жуликов, А. А. Дмитриевский, Письма в ЖЭТФ **68**, 400 (1998).
3. В. И. Альшиц, Е. В. Даринская, В. А. Морозов, В. М. Кац, А. А. Лукин, Письма в ЖЭТФ **91**, 97 (2010).
4. В. И. Альшиц, Е. В. Даринская, М. В. Колдаева, Е. А. Петржик, ФТТ **55**, 318 (2013).
5. В. И. Альшиц, Е. В. Даринская, М. В. Колдаева, Е. А. Петржик, Кристаллография **48**, 826 (2003).
6. Ю. И. Головин, ФТТ **46**, 769 (2004).

7. Р. Б. Моргунов, УФН **174**, 131 (2004).
8. V. I. Alshits, E. V. Darinskaya, M. V. Koldaeva, and E. A. Petrzhik, in *Dislocations in Solids*, ed. by J. P. Hirth, Elsevier, Amsterdam (2008), v. 14, p. 333.
9. Я. Б. Зельдович, А. Л. Бучаченко, Е. Л. Франкевич, УФН **155**, 3 (1988).
10. А. Л. Бучаченко, Р. З. Сагдеев, К. М. Салихов, *Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях*, Наука, Новосибирск (1978), 296 с.
11. U. E. Steiner and T. Ulrich, Chem. Rev. **89**, 51 (1989).
12. В. В. Кведер, Ю. А. Осипьян, А. И. Шалынин, ЖЭТФ **83**, 699 (1982).
13. В. Л. Бердинский, ЖЭТФ **91**, 2120 (1986).
14. X. W. Zhou, F. P. Doty, and P. Yang, Comp. Mater. Science **50**, 2470 (2011).
15. А. Ю. Белов, Кристаллография **32**, 550 (1987).