

НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ АТОМОВ ОЛОВА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ $Pb_{1-x}Sn_xTe$

*И.Н.Николаев, В.П.Потапов, А.П.Шотов,
Е.Е.Юрчакевич*

Обнаружено расщепление мессбауэровских спектров ядер ^{119}Sn в узкозонных полупроводниках $Pb_{1-x}Sn_xTe$, которое свидетельствует о переходе атомов олова в положение с симметрией локального окружения ниже кубической.

Полупроводники $Pb_{1-x}Sn_xTe$ представляют собой непрерывный ряд твердых растворов $PbTe - SnTe$, ширина запрещенной зоны которых изменяется в зависимости от состава x . В опытах по неупругому рассеянию нейтронов [1] и измерениям электросопротивления [2] в $SnTe$ и близких к нему составах были обнаружены особенности, которые можно приписать перестройке фононного спектра за счет структурных фазовых переходов. В тройных системах типа $Pb_{1-x}Sn_xTe$ подобные эффекты ранее не исследовались, хотя в теоретических работах [3, 4] для них также предсказываются фазовые переходы вследствие особенностей электронного спектра в различных точках зоны Бриллюэна. В связи с этим мы исследовали связь электронного и фононного спектров кристаллов $Pb_{1-x}Sn_xTe$ в широкой области составов при различных температурах.

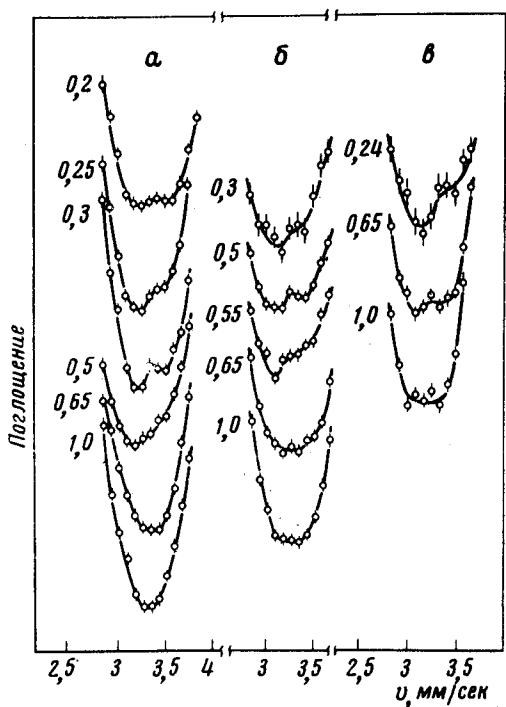
Информацию об изменениях структуры кристаллической решетки и фононного спектра можно получить сравнительно просто из измерений вероятности эффекта Мессбауэра f' . В частности, таким методом в работе [5] было обнаружено аномальное уменьшение f' в области бесщелевого состояния. Этот факт был объяснен смягчением оптических ветвей фононного спектра.

В настоящей работе мы провели детальное исследование формы мессбауэровских спектров ядер ^{119}Sn в $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с целью обнаружения особенностей поведения атомов олова в кристаллической решетке. Идея опытов состояла в следующем. Известно, что в кристаллах с кубической симметрией отсутствует квадрупольное расщепление энергетических уровней мессбауэровских ядер, при этом резонансный спектр имеет форму одиночной линии (в отсутствии сверхтонкого магнитного расщепления). Если же по какой-то причине кубическая симметрия окружения мессбауэровских атомов искажается, то на ядрах этих атомов появляется градиент электрического поля, который создает квадрупольное расщепление (в случае ядер ^{119}Sn мессбауэровский спектр становится дублетным). Таким образом, форма спектра дает информацию об относительном положении атомов Sn в элементарной ячейке.

Эффект Мессбауэра измеряли на порошкообразных поглотителях. Кристаллы $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с составами $0,13 \leq x \leq 1$ приготавливали по методике, описанной в работе [6]. После измельчения кристаллов в по-

рошкы проводили отжиг при 450°C (на неотожженных образцах обнаруженные закономерности проявлялись менее отчетливо). Применялась стандартная методика измерений эффекта Мессбауэра в геометрии пропускания; источником γ -квантов служила двуокись олова при комнатной температуре.

Как упоминалось выше, проявлением квадрупольного расщепления является дублетный характер резонансного спектра. Поэтому мы тщательно исследовали участки спектров вблизи резонансной скорости, где ожидаемое расщепление могло проявиться наиболее отчетливо. На рисунке показаны участки спектров образцов с различными составами при температурах 78, 205 и 300К. Действительно, при каждой температуре в определенном интервале составов наблюдается расщепление $\sim 0,3 \text{ мм/сек}$. Отметим, что расщепление проявляется при различных x в зависимости от температуры.



Участки мессбауэровских спектров ядер ^{119}Sn в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ вблизи резонансной скорости. Число импульсов на точку в спектрах составляет $\sim 10^6$. *a* – $T = 78\text{K}$, *b* – $T = 205\text{K}$, *c* – $T = 300\text{K}$. Цифры слева от спектров обозначают содержание олова x

Наиболее простое объяснение – связать наблюдаемый дублет с существованием двух фаз, каждая из которых дает одиночную линию в соответствии с определенной конфигурацией ближайшего окружения атомов олова, – не проходит. Согласно такому объяснению, расщепление не должно зависеть от температуры для фиксированного состава, что противоречит эксперименту. Так, например, для состава с $x = 0,65$ расщепление уменьшается с понижением температуры.

Поэтому обнаруженное расщепление в мессбауэровских спектрах свидетельствует о переходе атомов олова в положение с симметрией локального окружения ниже кубической. При этом имеются две возможности: либо кристаллическая решетка полупроводника остается кубичес-

кой, а атомы олова лишь немного смещаются из узлов решетки в междоузлия, либо происходит фазовый переход всего кристалла в состояние с не кубической симметрией.

Московский
инженерно-физический институт

Поступила в редакцию
30 ноября 1976 г.
После переработки
3 января 1977 г.

Литература

- [1] G.Dolling, W.I.L.Bugers, J.Nonmetals, 1, 159, 1973.
- [2] K.Kobayashi, Y.Kato, Y.Katagama, F.Komatsubara. Sol. St. Camm., 17, 875, 1975.
- [3] Б.А.Волков, Ю.В.Копаев. ЖЭТФ, 64, 2184, 1973.
- [4] Б.А.Волков, О.А.Панкратов. Препринт ФИАН, №111, 1976.
- [5] И.Н.Николаев, А.П.Шотов, А.Ф.Волков, В.П.Марьин, Письма в ЖЭТФ, 21, 144, 1975.
- [6] А.П.Шотов, И.В.Кучеренко, Ю.Н.Королев, Е.Г.Чижевский. ФТП, 6, 1508, 1972.