

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ СЛУЧАЙНЫМИ ДЕФОРМАЦИЯМИ В КРИСТАЛЛАХ LaAlO_3 , АКТИВИРОВАННЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ

Н.М. Абишев¹, К.Н. Болдырев², Б.З. Малкин¹, И.Э. Мумджи¹, С.И. Никитин¹, М.Н. Попова²

¹*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, г. Казань*

²*Институт Спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк*

Кристаллы LaAlO_3 имеют широкое применение в качестве подложки для эпитаксиального роста кристаллов и синтеза тонкопленочных гетероструктур. При температуре $T_S=813$ К в кристаллах LaAlO_3 имеет место структурный переход из высокотемпературной кубической фазы в ромбоэдрическую, сопровождающийся формированием сегнетоэластических доменов с различными ориентациями тригональной оси симметрии. Исследования спектральных характеристик микроскопически неоднородных кристаллов являются актуальными задачами спектроскопии конденсированных сред.

В настоящей работе представлены результаты измерений оптических спектров поглощения и люминесценции высокого разрешения и селективной лазерной спектроскопии кристаллов LaAlO_3 , активированных редкоземельными (РЗ) ионами (Ho^{3+} , Tm^{3+} , Pr^{3+}). Особый интерес представляют обнаруженные в измеренных спектрах линии с дублетной структурой. Мы предполагаем, что наблюдаемая тонкая структура и сильное неоднородное уширение линий обусловлено наличием в кристаллах алюмината лантана внутренних полей деформаций, индуцированных границами доменов и собственными точечными дефектами. Аналогичные профили спектральных линий наблюдались ранее в кристаллах различной структуры, содержащих РЗ ионы [1,2].

Анализ штарковской структуры спектров РЗ ионов был выполнен в рамках теории кристаллического поля. Операторы Гамильтона РЗ ионов в LaAlO_3 , включающие операторы энергии свободного иона и энергию взаимодействия с кристаллическим полем, были построены и диагонализированы в пространстве состояний основной электронной конфигурации $4f^N$. Параметры кристаллического поля были вычислены в рамках модели обменных зарядов. Моделирование огибающих линий с дублетной структурой включало расчеты параметров электрон-деформационного взаимодействия с последующим усреднением спектральных распределений интенсивностей оптических переходов с функцией распределения случайных деформаций, обусловленных точечными дефектами либо доменными стенками.

Расчеты штарковской структуры мультиплетов и моделирование формы спектральных линий выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 19-32-90044).

1. N.M. Abishev, E.I. Baibekov, B.Z. Malkin, M.N. Popova, D.S. Pytalev, S.A. Klimin. Deformation Broadening and the Fine Structure of Spectral Lines in Optical Spectra of Dielectric Crystals Containing Rare-Earth Ions, Phys. Solid State 61, 795 (2019)

2. B.Z. Malkin, N.M. Abishev, E.I. Baibekov, D.S. Pytalev, K.N. Boldyrev, M.N. Popova, M. Bettinelli, Distribution function of random strains in elastically anisotropic continuum and defect strengths of impurity Tm^{3+} ions in crystals with the zircon structure, Phys. Rev. B 96, 014116 (2017)