

## Деформационное уширение и расщепление линий в оптических спектрах кристалла $\text{LaAlO}_3:\text{Ho}^{3+}$

***Н. М. Абишев<sup>1</sup>, К. Н. Болдырев<sup>2</sup>, Б. З. Малкин<sup>1</sup>,  
И. Э. Мумджи<sup>1</sup>, С. И. Никитин<sup>1</sup>, М. Н. Попова<sup>2</sup>***

<sup>1</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>2</sup> Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

Кристаллы  $\text{LaAlO}_3$  широко используются в современных технологиях, в частности, в качестве подложки для эпитаксиального роста кристаллов и синтеза тонкопленочных гетероструктур. Обнаружение двумерного электронного газа в интерфейсах  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  [1] стимулировало новые исследования, направленные на их применение. При температуре  $T_S=813$  К в кристаллах  $\text{LaAlO}_3$  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 и селективной лазерной спектроскопии кристалла  $\text{LaAlO}_3$ , активированного ионами  $\text{Ho}^{3+}$ . Зарегистрированные спектральные линии соответствуют переходам между подуровнями мультиплетов иона  $\text{Ho}^{3+}$  в тригональном кристаллическом поле. Линии, отвечающие переходам между двукратно вырожденным и невырожденным подуровнями, характеризуются специфическим провалом в центре линии. Аналогичные профили спектральных линий наблюдались ранее в кристаллах различной структуры, содержащих редкоземельные ионы [2,3]. Формирование тонкой структуры синглет-дублетных переходов обусловлено взаимодействием оптических центров со случайными деформациями кристаллической решетки, индуцированными, в частности, точечными дефектами.

Анализ штарковской структуры спектра иона гольмия был выполнен в рамках теории кристаллического поля. Оператор Гамильтона иона гольмия в  $\text{LaAlO}_3$ , включающий операторы энергии свободного иона и энергию взаимодействия с кристаллическим полем, был построен и диагонализирован в пространстве 1001 состояний основной электронной конфигурации  $4f^{10}$ . Параметры кристаллического поля были вычислены в рамках модели обменных зарядов.

Моделирование огибающих линий с дублетной структурой включало расчеты параметров электрон-деформационного взаимодействия и функций распределения случайных деформаций, обусловленных точечными дефектами либо доменными стенками, используемых при усреднении спектральных распределений интенсивностей оптических переходов. В работе [3] было показано, что функция распределения деформаций, индуцируемых точечными дефектами в упруго-анизотропной среде, с хорошей степенью точности может быть представлена обобщенной функцией Лоренца. Ширина функции распределения, прямо пропорциональная произведению «силы дефекта» и объемной концентрации точечных дефектов, была найдена из сравнения вычисленных огибающих спектральных линий для различных переходов с данными измерений. Результаты работы могут быть использованы для количественной оценки качества кристаллов.

*Расчеты штарковской структуры мультиплетов (Б.З.М.) и моделирование формы спектральных линий (Н.М.А.) выполнены при поддержке Российского научного фонда (Грант № 19-12-00244) и Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 19-32-90044), соответственно.*

1. A. Ohtomo, H.Y. Hwang. A high-mobility electron gas at the  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  heterointerface. *Nature* 427, 423 (2004).
3. 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).
4. B.Z. Malkin, N.M. Abishev, E.I. Baibekov, D.S. Pytalev, K.N. Boldyrev, and M.N. Popova, M. Bettinelli, Distribution function of random strains in elastically anisotropic continuum and defect strengths of impurity  $\text{Tm}^{3+}$  ions in crystals with the zircon structure, *Phys. Rev. B* 96, 014116 (2017).