ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
Т. 63, № 12 ФИЗИКА 2020

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 538.913:538.958 DOI: 10.17223/00213411/63/12/52

А.С. ПОПЛАВНОЙ

ОСОБЕННОСТИ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ С РЕШЕТКОЙ КУПРИТА, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ СТРУКТУРОЙ ПОДРЕШЕТОК

Различная трансляционная симметрия подрешеток кристалла куприта учитывается путем развертывания фононного спектра из зоны Бриллюэна кристалла в зоны Бриллюэна аниона и металла. Такое представление спектра целесообразно из-за того, что шесть оптических ветвей преимущественно обусловлены колебаниями анионов и двенадцать акустических ветвей – колебаниями металла за счет существенного различия величин их масс. Объемы зон Бриллюэна подрешеток аниона и металла больше объема зоны Бриллюэна кристалла в 2 и 4 раза соответственно, что приводит к качественному различию соответствующих развернутых спектров, из-за наличия колебаний типа дисторции тетраэдров металла в акустической части спектра. Эти колебания ответственны за отрицательное тепловое расширение и расположены на линиях X′(1,0,0)–W′(1,0,1/2), X′(0,1,0)–W′(0,1,1/2) зоны Бриллюэна металла. Развернутые спектры содержат по три ветви в соответствующих зонах Бриллюэна, что упрощает правила отбора для физических явлений, обусловленных участием колебаний частиц подрешеток.

Ключевые слова: *куприт, фононный спектр, подрешетки, развернутый спектр.*

Введение

Оксиды меди и серебра, имеющие решетку куприта, обладают уникальными структурными, физическими и физико-химическими свойствами и поэтому интересны как с теоретической, так и с прикладной точки зрения. Cu_2O известен как полупроводник *p*-типа, перспективный для применения в солнечной энергетике и катализе [1, 2]. Особенности химической связи в этом соединении интересны с точки зрения понимания механизмов высокотемпературной сверхпроводимости [3]. Ag_2O также рассматривался как потенциальный сверхпроводник необычного типа [4]. Установлена возможность использования Ag_2O в составе суперионных стекол $AgI–Ag_2O–B_2O_3$, $AgI–Ag_2O–V_2O_3$, $AgI–Ag_2O–P_2O_5$ [5, 6]. Ag_2O также перспективен как материал для электрических, оптических и магнитооптических устройств [7]. Интенсивно изучается необычное свойство Cu_2O и Ag_2O – отрицательное тепловое расширение [8].

Со структурной точки зрения уникальность кристаллов куприта заключается в том, что кристаллическая решетка относится к простому пространственному типу Браве Γ_c, подрешетка анионов – к объемноцентрированному типу Γ_c и катионов – к гранецентрированному типу Γ_c^f. Таким образом, в формировании решетки задействованы все три типа Браве кубической системы. Генезис зонных спектров кристаллов Cu_2O и Ag_2O из состояний их подрешеток установлен в работе [9]. Показано, что топологические особенности спектров обусловлены свертыванием ветвей спектров из зон Бриллюэна (ЗБ) подрешеток в ЗБ кристалла. Полезной является и обратная процедура – развертывание ветвей спектров из ЗБ кристалла в ЗБ подрешеток. Это особенно актуально для колебательных спектров кристаллов, где число ветвей равно числу степеней свободы в элементарной ячейке. В кристаллах куприта число степеней свободы катионов в два раза больше числа степеней свободы анионов, соответствующим образом происходит и формирование фононных ветвей кристалла. К примитивным ячейкам подрешеток анионов и катионов относят по одной частице, следовательно, имеется по три степени свободы и соответственно по три фононных ветви. Процедура развертывания фононных спектров кристалла в ЗБ подрешеток как раз и выявляет эти фундаментальные ветви, из которых строится полный фононный спектр. Такая процедура оказывается возможной и целесообразной из-за существенного различия величин масс анионов и катионов, что приводит к формированию ветвей фононного спектра с преимущественным вкладом колебаний атомов той или иной подрешетки. Изложенный подход применен в представленной работе к анализу колебательного спектра кристалла Cu_2O.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725