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

В. И. Альшиц<sup>1)</sup>, 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  $\theta$  не зависят. В рамках используемой модели "замороженных" магнитных моментов, связанных с примесным центром Ca<sup>+</sup>–Cl<sup>0</sup>, 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

<sup>&</sup>lt;sup>1)</sup>e-mail: alshits@ns.crys.ras.ru

 $3 \times 3 \times 5$  мм<sup>3</sup> выкалывались по плоскостям спайности {100}. Перед экспериментом в них вводились свежие дислокации с плотностью  $\rho_{\rm fr} \sim 10^4 \, {\rm cm}^{-2}$  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 (100) и плоскостями скольжения {110}.

Магнитное поле Земли  $\mathbf{B}_{Earth}$ , измеренное в месте нахождения образца, составляло угол 29.5° с вертикалью и равнялось 49.97 мкТл. Поле накачки  $\tilde{\mathbf{B}} \perp \mathbf{B}_{Earth}$  создавалось в коаксиальной экранированной камере вокруг медного стержня, по которому пропускался синусоидальный ток, обеспечивающий амплитуду  $\tilde{B}_m = 2.5$  мкТл. Частота этого поля варыровалась в интервале  $\nu = (5-440)$  кГц. Образец устанавливался так, чтобы его грань (100) совпадала с плоскостью полей { $\mathbf{B}_{Earth}, \tilde{\mathbf{B}}$ }, а угол  $\theta$  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  $\mathbf{B}_{\mathrm{Earth}}$  и  $\tilde{\mathbf{B}}$ . Показаны ямки травления краевой дислокации ( $\mathbf{L} \parallel [100]$ ), 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  $\theta$  между образцом и полем **B**<sub>Earth</sub>. Она описывалась эмпирической формулой

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

Здесь  $\theta_1 = \theta$ ,  $\theta_2 = 90^\circ - \theta$ ,  $g \approx 2$  – фактор Ланде,  $\mu_{\rm B}$  – магнетон Бора, h – постоянная Планка, а величина  $\nu_0$  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"  $\mathrm{Ca}^+ - \mathrm{Cl}^0$ . 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  $\mathrm{Ca}^+ - \mathrm{Cl}^0$ , и их ориентация относительно  $\mathbf{B}_{\mathrm{Earth}}$ 

емановское расщепление должны быть пропорциональны сов  $\theta_{1,2}^M$ , где  $\theta_{1,2}^M = \angle(\mathbf{M}_{1,2}, \mathbf{B}_{\text{Earth}})$ . В формуле (1) предполагается, что речь идет о моментах, ортогональных дислокации и направленных параллельно ребрам образцов  $\langle 100 \rangle$ , т.е.  $\theta_{1,2} \approx \theta_{1,2}^M$ .

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  $\theta_1 = \theta = 22.5^\circ$  и  $\theta_2 = 67.5^\circ$  в поле Земли  $B_{\text{Earth}} \approx 117$  мкТл. В [4] к ним были добавлены пики при  $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $45^\circ$  и  $\theta_2 = 60^\circ$ , снятые для кристаллов другого происхождения при другом поле  $B_{\rm Earth} \approx 50$  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. За из этих данных оставлены только точки, относящиеся к исследуемому кристаллу NaCl<sub>LOMO</sub>. К ним добавлена точка, отвечающая приведенному ниже низкочастотному пику (75 кГц) при  $\theta_2 = 85^\circ$  (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  $\theta_{1,2}$  ( $\theta_1 < 45^\circ$ ,  $\theta_2 > 45^\circ$ );  $\nu_0 = \nu(0) = 1.38 \,\mathrm{MF}$ ц. На рис. а сплошная линия – график косинусоиды, штриховая – та же косинусоида, сдвинутая влево на 2°. На вставке – схема ориентации образца относительно **B**<sub>Earth</sub>. 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)  $\theta_i \rightarrow \theta_i + 2^\circ$ 

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

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

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

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

Физическая сущность поправки  $\Delta \theta$  довольно очевидна. Не следует забывать, что углы  $\theta_{1,2}^M$ , 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 зеркальносимметричная относительно (010) картина для дис-

Письма в ЖЭТФ том 99 вып. 1-2 2014

локации, скользящей в плоскости (011), 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 **B**<sub>Earth</sub> двух симметрийно эквивалентных магнитных моментов **M**<sub> $\alpha$ </sub> примесных центров в ядрах дислокаций при их перемещении в плоскостях скольжения (011) и (011)

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<sup>+</sup>–Cl<sup>0</sup>, характеризуемых разными углами  $\Delta \theta_{\alpha}$ . Каждой из них должны отвечать два пика пробегов с резонансными частотами, даваемыми формулой (1) с заменой  $\theta_i \rightarrow \theta_i \pm \Delta \theta_{\alpha}$ .

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

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

где  $A = \pi \nu_0 / 180^\circ \approx 24.05 \, \mathrm{k}\Gamma \mathrm{l}/\mathrm{град}$ . Здесь мы воспользовались равенством  $90^\circ - \theta_2 = \theta$  и малостью аргумента синуса в радианной мере. Из (3) вытекают формулы

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

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

$$\overline{\Delta\theta_1} = 0.90^\circ, \quad \overline{\Delta\theta_2} = 2.63^\circ. \tag{5}$$



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

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

Таблица 1

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

$\theta$	$ ilde{ heta}_1$	$ ilde{ heta}_2$	$\Delta \theta_1$	$\Delta \theta_2$
$5^{\circ} \\ 4^{\circ} \\ 2.5^{\circ}$	$4.78^{\circ}$ $3.74^{\circ}$ $2.50^{\circ}$	$4.99^{\circ} \\ 3.95^{\circ} \\ 3.12^{\circ}$	$1.04^{\circ}$ $0.83^{\circ}$ $0.83^{\circ}$	$2.49^{\circ}$ $2.70^{\circ}$ $2.70^{\circ}$
Среди	ние знач	$0.90^{\circ}$	$2.63^{\circ}$	

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<sup>+</sup>–Cl<sup>0</sup>, 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]:

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

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

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

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 [011]. 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

Письма в ЖЭТФ том 99 вып. 1-2 2014



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

Таблица 2

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 Са. На рис. 6 просто рассмотрен ряд альтернативных позиций для гантелей Ca<sup>+</sup>–Cl<sup>0</sup> в структуре ядра без учета подвижек атомов вокруг нового дефекта. Пренебрежение искажениями решетки, связанными с замещением иона Na<sup>+</sup> на Ca<sup>+</sup>, возможно, не столь критично из-за близости их ионных радиусов. Более серьезных погрешностей можно ожидать от игнорирования замены иона Cl<sup>-</sup> на нейтральный атом Cl<sup>0</sup> и стоящую рядом отрицательную вакансию V<sub>Na+</sub>. Тем не менее найденная структура, по-видимому, годится для полукачественного сравнения с экспериментальными данными.

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

Как и ожидалось, преобладающее число позиций примесного центра пиннинга в ядре дислокации (13

Абсолютные значения расчетных углов  $\Delta \theta^{mod}_{\alpha}$ отклонения моментов  $M_{\alpha}$  от ближайших направлений (100) в идеальной решетке NaCl

$j \setminus i$	1	2	3	4	5	6
$     \begin{array}{c}       1 \\       2 \\       3 \\       4 \\       5 \\       6 \\       7 \\       8 \\       9 \\       9     \end{array} $	$1.9^{\circ}$ $1.0^{\circ}$ $1.9^{\circ}$ $5.7^{\circ}$	$17.6^{\circ} \\ 5.1^{\circ} \\ 9.2^{\circ} \\ 2.5^{\circ}$	$0.8^{\circ} \\ 6.0^{\circ} \\ 3.2^{\circ} \\ 0.6^{\circ}$	${\begin{array}{*{20}c} 1.8^{\circ} \\ 1.0^{\circ} \\ 0.6^{\circ} \\ 4.0^{\circ} \end{array}}$	$3.9^{\circ} \\ 2.8^{\circ} \\ 21.3^{\circ}$	$8.0^{\circ}$ $8.0^{\circ}$ $2.9^{\circ}$ $1.0^{\circ}$

из 23) характеризуется малыми отклонениями  $\Delta \theta_{\alpha}^{\text{mod}}$ оси гантели от направлений (100). 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:

$$\overline{\Delta\theta_1^{\text{mod}}} \approx 0.83^\circ, \quad \overline{\Delta\theta_2^{\text{mod}}} \approx 2.43^\circ$$
 (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  $\Delta \theta_{\alpha}^{\text{mod}}$ , 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:

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

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  $\theta_2 = 90^{\circ}(\theta = 0)$ . 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  $\Delta \theta_1 = 1.2^\circ$ , 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 бо́льшим углам  $\Delta \theta$ , такая погрешность перестает быть критичной. Уже второй пик характеризуется углом  $\Delta \theta_2 = 2.5^{\circ}$ , 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).

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

Письма в ЖЭТФ том 99 вып. 1-2 2014

- 7. Р.Б. Моргунов, УФН 174, 131 (2004).
- 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.
- 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 ре-

акциях, Наука, Новосибирск (1978), 296 с.

- 11. U.E. Steiner and T. Ulrich, Chem. Rev. 89, 51 (1989).
- В.В. Кведер, Ю.А. Осипьян, А.И. Шалынин, ЖЭТФ 83, 699 (1982).
- 13. В. Л. Бердинский, ЖЭТФ **91**, 2120 (1986).
- X. W. Zhou, F. P. Doty, and P. Yang, Comp. Mater. Science 50, 2470 (2011).
- 15. А.Ю. Белов, Кристаллография 32, 550 (1987).