

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Ussam На правах рукописи

Хоссени Уиссам Адел Лотфи

**АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ
В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Екатеринбург – 2023

Работа выполнена на кафедре экспериментальной физики Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Научный руководитель: Доктор физико-математических наук, профессор,
Гудков Владимир Васильевич

Официальные оппоненты: **Рябочкина Полина Анатольевна**,
доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва», г. Саранск, заведующий кафедрой фотоники;

Неверов Владимир Николаевич,
доктор физико-математических наук, профессор РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, заведующий лабораторией полупроводников и полуметаллов;

Крайнов Игорь Вадимович,
кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург, научный сотрудник сектора теории оптических и электрических явлений в полупроводниках

Защита состоится «09» июня 2023 г. в 17:00 ч на заседании диссертационного совета УрФУ 1.3.02.06 по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», <https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?id=12&rid=4637>.

Автореферат разослан «__» мая 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Эффект Яна–Теллера (ЭЯТ) [1] играет важную роль в формировании структуры молекул и кристаллов и влияет на их физические свойства. Это обсуждается при изучении магнитных материалов, перовскита, мультиферроиков, графенов, фуллеренов и лазерных кристаллов. В кристаллах ЛТЕ существует в двух вариантах: как кооперативный эффект, когда центры Яна – Теллера (ЯТ) реализованы в кристаллической решетке, или как явление в системе невзаимодействующих комплексов, инициируемых вакансиями или примесями, часто представленными 3d-ионами в качестве катионного замещения. Такие кристаллы и особенно фториды, давшие название явлению, известному как флуоресценция, вызывают исключительный интерес и используются в оптических приборах.

Ионы переходных металлов с орбитальным вырожденным состоянием проявляют ЛТЕ и, следовательно, имеют гораздо более сложную электронную структуру. Количественная информация о взаимодействии электрон-решетка и электронной структуре обязательна для использования этих кристаллов в электронных и оптических устройствах. Таким образом, изучение адиабатического потенциала (АП) ЯТ комплексов является актуальной задачей, как с точки зрения фундаментальных исследований, так и с точки зрения практического применения.

Степень разработанности темы исследования

Традиционными методами исследования ЛТЕ in в примесных кристаллах являются изучение спектров оптического излучения и поглощения и электронного спинового резонанса (ЭПР) [2,3]. Эксперименты по физической акустике, обычно используемые в физике твердого тела (см., например, [4]), не могут рассматриваться как традиционные методы исследования ЭЯТ, хотя первые публикации в этой области датируются 1960-ми годами (см. обзор Стерджа [5], параграф 9). Сначала эксперименты проводились с использованием резонансного метода: механического резонанса образца Al_2O_3 , легированного ионами Ni^{3+} . В ультразвуковом эксперименте частота возбуждения слишком мала, чтобы организовать резонансные переходы между энергетическими уровнями ЯТ комплекса. Следовательно, диссипация ультразвуковой энергии и дисперсия, обусловленные ЭЯТ, носят релаксационный характер и относятся только к состоянию с наименьшей энергией (основному).

Релаксация возникает в результате неравновесного распределения, инициированного ультразвуковой волной в системе ЯТ комплексов, которые

представляют собой термодинамический ансамбль. В рамках феноменологического подхода процесс релаксации характеризуется временем релаксации. Оно может быть получено в ультразвуковом эксперименте, если внешний параметр (температура, магнитное поле и т.д.) значительно изменяет свое значение. Температурная зависимость времени релаксации дает информацию о механизмах релаксации, обусловленных свойствами ЯТ комплексов. Эта зависимость была достигнута исследованием ЭЯТ с помощью первых ультразвуковых экспериментов. Эта информация не может быть получена ЭПР и оптическими методами: в ЭПР изучается спин-спиновая и спин-решеточная релаксация, в то время как в оптических спектрах исследуются переходы между основным и возбужденным состояниями.

Недавние ультразвуковые исследования допированных кристаллов показали новые преимущества для получения количественных данных о параметрах ЯТ комплексов (см. [6, 7] и ссылки в них). Если симметрия деформаций, создаваемых волной, соответствует симметрии локальной колебательной моды, возникает новый канал диссипации энергии. Исследование, проведенное с волнами различной поляризации, дает исключительную возможность выявить активные локальные моды и, следовательно, симметричные свойства глобальных минимумов АП.

Цель и задачи работы:

Целью диссертации является всестороннее изучение симметричных свойств глобальных минимумов и седловых точек АП ЯТ комплексов в кристаллах со структурой флюорита, легированных 3d-ионами; на основе экспериментальных данных рассчитать энергии ЯТ стабилизации и координаты экстремумов АП, определенные в 5-мерной системе координат, соответствующей симметричным (тригональным и тетрагональным) деформациям кубического ЯТ комплекса.

Для достижения цели работы необходимо было решить следующие задачи:

1. Вычисление линейных и квадратичных констант вибронной связи, энергий стабилизации и координат экстремумов АП ЯТ комплекса в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$.

2. Анализ результатов исследований температурных зависимостей затухания нормальных мод в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$. Определение свойств симметрии глобальных минимумов и седловых точек АП. Расчет констант вибронной связи, энергий ЯТ стабилизации и координат экстремумов АП.

3. Анализ результатов исследований температурных зависимостей затухания нормальных мод в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$. Определение симметричных

свойств глобальных минимумов АП и седловых точек, вычисление констант вибронной связи, энергий ЯТ стабилизации и координат экстремумов АП.

4. Анализ результатов исследований температурных зависимостей затухания нормальных мод в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$. Определение симметричных свойств глобальных минимумов АП и седловых точек, вычисление констант вибронной связи, энергий ЯТ стабилизации и координат экстремумов АП.

5. Выявление общих свойств и различий ЯТ комплексов в исследованных соединениях.

Научная новизна:

1. Было обнаружено, что АП ЯТ комплексов всех исследованных нами кристаллов, обладающих структурой флюорита, с изовалентным замещением катиона ионом переходного металла, а именно $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$, $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ [конфигурация свободного иона d^4 , орбитальный терм ЯТ иона ${}^5T_{2g}(e_g^2 t_{2g}^2)$], $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$ [d^9 , ${}^2T_{2g}(e_g^4 t_{2g}^5)$] и $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ [d^8 , ${}^3T_{1g}(e_g^4 t_{2g}^4)$] описывается квадратичной $T \otimes (e + t_2)$ задачей ЭЯТ, т.е., имеет глобальные минимумы орторомбической симметрии. Наименьшие потенциальные барьеры образованы тригональными седловыми точками, а самые большие - тетрагональными.

2. Получены количественные данные о линейных и квадратичных константах вибронной связи, энергиях ЯТ стабилизации, координатах экстремумов АП в 5-мерной системе симметризованных смещений.

3. На основе данных ультразвуковых экспериментов были рассчитаны параметры АП и найдены параметры, не зависящие от концентрации ЯТ ионов: энергия активации V_0 и отношение констант линейной вибронной связи $|F_T/F_E|$ с помощью которого сравнивались изученные кристаллы.

Теоретическая и практическая значимость работы:

1. Метод, используемый для определения симметричных свойств, показал свою эффективность и однозначность результатов. Он может быть рекомендован для использования при дальнейшем исследовании АП в легированных кристаллах с помощью ультразвукового эксперимента.

2. Полученные результаты расширяют фундаментальное понимание механизма формирования АП в случае трижды вырожденных орбитальных состояний: четыре ближайших соседа приводят к тетрагональным глобальным минимумам АП, восемь - к орторомбическим.

3. Отношение констант линейной вибронной связи $|F_T/F_E|$ близко к единице и предположение о $|F_T| \approx |F_E|$ может быть обоснованно использовано при расчете модели АП в случае, когда в эксперименте определена только одна константа вибронной связи.

Методология и методы исследования

Методология оценки параметров АП в кубическом кристалле основана на методе исследования средствами физической акустики. Она предполагает использование данных о температурных зависимостях затухания и фазовой скорости нормальных мод: двух поперечных волн (или одной поперечной и одной продольной мод), распространяющихся вдоль кристаллографических осей [110]. Аномалии во всех изученных модах указывают на орторомбическую симметрию глобальных минимумов АП, аномалии в тетрагональной моде показывают тетрагональную симметрию глобальных минимумов АП, в то время как аномалии в тригональной моде свидетельствует о тригональной симметрии глобальных минимумов АП.

После выделения ЯТ вклада в затухание ультразвука строится температурная зависимость времени релаксации и рассчитываются константы линейной вибронной связи. Моделирование температурной зависимости времени релаксации с использованием трех механизмов (термическая активация, туннелирование через потенциальный барьер и двухфононный механизмы [5]) показывает величину энергии активации, которая позволяет рассчитать значение потенциального барьера, являющегося самой низкой седловой точкой. Рассчитанные величины линейных констант вибронной связи позволяют вычислить значения соответствующих энергий ЯТ стабилизации. Координаты глобальных минимумов АП рассчитываются с использованием выражений, приведенных в разделе 3.3 в [8], или в случае орторомбических глобальных минимумов выражений, опубликованных в [9].

Положения, выносимые на защиту:

1. АП ЯТ комплексов в кристаллах со структурой флюорита с изовалентным замещением катиона ионом переходного металла, $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$, $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$ и $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$, описывается квадратичной задачей ЭЯТ, т.е. имеет орторомбические глобальные минимумы, наименьшие потенциальные барьеры образованы тригональными седловыми точками, а самые большие имеют тетрагональную симметрию.

2. Параметрами АП, рассчитанными на основе ультразвуковых данных и не зависящими от концентрации ЯТ ионов, являются энергия активации и отношение линейных констант вибронной связи. В большинстве соединений энергия активации варьируется в диапазоне $90 - 400 \text{ cm}^{-1}$.

3. Изотермический ЯТ вклад во все модули упругости в кубическом кристалле зависит как от тетрагональных, так и от тригональных линейных констант вибронной связи, если комплекс подвергается статической деформации хотя бы вдоль одной из кубических осей.

Степень достоверности результатов работы

Достоверность результатов определяется использованием данных, полученных на сертифицированных экспериментальных установках и сертифицированных компьютерных программах. Результаты, полученные в ходе работы, которые можно сравнить с оптическими экспериментами или ЭПР, хорошо согласуются с опубликованными литературными данными.

Апробация работы.

Основные результаты диссертации были представлены и обсуждены на 6 российских и международных конференциях, конгрессах, симпозиумах: XIV Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск, Российская Федерация, RCS – 2019), XXIII Уральской международной зимней школе по физике полупроводников (Екатеринбург, Россия, 2020), VII Международной молодежной научной конференции "Физика. Технология. Инновации» (Екатеринбург, Россия, 2020), Научной сессии НИЯУ МИФИ по направлению Инновационные ядерные технологии (Снежинск, Россия, 2020), VIII Международной молодежной научной конференции "Физика. Технология. Инновации» (Екатеринбург, Россия, 2021), IX Международной молодежной научной конференции "Физика. Технология. Инновации» (Екатеринбург, Россия, 2022).

Личный вклад автора

Тема диссертации и объекты исследования были предложены научным руководителем. Эксперименты по поглощению и скорости ультразвука были проведены М.Н. Сарычевым с помощью автора диссертации.

Автор провел весь комплекс расчетов, включая составление программы для обработки данных, которая использовалась для оценки параметров АП исследуемых ЯТ комплексов. Автор принимал активное участие в подготовке научных публикаций и лично представил 6 докладов на перечисленных выше конференциях.

Исследуемые кристаллы были выращены в Физико-техническом институте им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН проф. В.А. Улановым и в Институте геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения РАН проф. А.В. Еграновым. Состав образцов был исследован В.Т. Суриковым в Институте химии твердого тела Уральского отделения РАН.

Публикации

По теме диссертации автор опубликовал 5 статей, в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и проиндексированных в международных базах данных Scopus и/или WoS.

Структура и объем диссертации

Диссертация содержит введение, 5 глав, заключение и список использованной литературы. Объем диссертации составляет 85 страницы, включая 22 рисунка, 13 таблиц и библиографический список из 83 наименований и авторский список основных публикаций (5 статей и 6 докладов на конференциях).

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, научная новизна полученных результатов и показана их практическая значимость, представлены защищенные положения, апробация работы и структура диссертации.

В 1-й главе «Обзор литературы» дается исторический обзор ЭЯТ, связанный с теоремой, сформулированной Германом Артуром Яном и Эдвардом Теллером в 1937 году. Теорема утверждает, что высокосимметричное состояние молекулы с орбитальным вырождением неустойчиво, а стабильное состояние достигается за счет деформаций, которые понижают симметрию молекулы. Рассмотрено теоретическое описание ЭЯТ, основанное на решении уравнения Шредингера с вибранным гамильтонианом. Описание ЭЯТ в легированных кристаллах основано на молекулярной модели, в которой ЯТ комплекс содержит ЯТ ион и ближайшее окружение. В рамках феноменологического подхода состояние подсистемы может быть описано с помощью некоторого термодинамического потенциала. Методы исследования средствами физической акустики реализовывались с учетом изотермического упругости и динамического с действительной и мнимой составляющими. На основе уравнения Зинера [10] было получено выражение для коэффициента затухания α^{JT} , соответствующего вкладу ЯТ подсистемы в динамический модуль упругости кристалла.

Первая экспериментальная работа по изучению ЭЯТ ультразвуковым методом относится к 60-м годам 20 века, в качестве примера использовался кристалл $\text{Al}_2\text{O}_3: \text{Ni}^{3+}$ [5]. Аномалии в температурных зависимостях затухания имели релаксационную природу, было получено выражение для затухания, из которого следует, что существует возможность определения температурной зависимости времени релаксации ЯТ подсистемы и оценки значений линейных констант вибранный связи.

Прямым продолжением работ группы Стурджа следует считать исследования ЭЯТ ультразвуковыми методами в соединениях $A^{II}B^{VI}:3d^{2+}$ с кристаллической структурой сфалерита (см., например, работу [11] и ссылки в ней).

Во 2-й главе «Изученные кристаллы и экспериментальная техника», показана структура кристалла типа флюорита с $3d$ -ионом замещения. Эксперименты проводились в Уральском федеральном университете с использованием установки, структурная схема которой работала как частотно-регулируемый мост. Он основан на методе радиоимпульсного эха и прямоугольной частотной модуляции для управления фазой сигнала.

1. Монокристалл CaF_2 , легированный Cr^{2+} , был получен в Физико-техническом институте им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН методом Чохральского. Концентрацию легирующей примеси в этом случае и во всех других исследованных кристаллах измеряли в Институте химии твердого тела Уральского отделения РАН с помощью четырехканального прибора ELAN 9000 ICP-MS (Perkin-Elmer SCIEX). Концентрация ионов хрома оказалась равной $n = (4.74 \pm 0.03) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Результат рентгеноструктурного анализа кристалла $CaF_2:Cr$, выполненного в геометрии Брегга-Брентано с шагом 0.04 град.

2. Монокристалл $SrF_2:Cr^{2+}$ выращен в Физико-техническом институте им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН по методике Чохральского в атмосфере гелия. Концентрация иона хрома $n = (1.60 \pm 0.03) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

3. Кристалл CaF_2 , легированный ионами Ni^{2+} , был выращен из расплава методом Бриджмена-Стокбаргера в атмосфере гелия в Институте геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения РАН.

4. Кристалл $CaF_2:Cu^{2+}$ был получен в Физико-техническом институте им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН по методу Чохральского. Концентрация ионов меди составляла $n = (7.12 \pm 0.03) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

В 3-й главе «Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов в кристалле $SrF_2:Cr^{2+}$ », сделан вывод о том, что изотермический ЯТ вклад во все модули упругости в кубическом кристалле зависит как от тетрагональных, так и от тригональных линейных констант вибронной связи. В случае $SrF_2:Cr^{2+}$ аномалии в $c_{44}(T)$ были значительно большими, чем в $c_E(T)$, что свидетельствует об орторомбической симметрии глобальных минимумов АП, согласно таблице 1.

Таблица 1 – Изотермический вклад кубических ЯТ комплексов в модули упругости кристалла типа флюорита. a_0 - расстояние между ЯТ ионом и ближайшим соседом (ионом фтора) [7].

Symmetry properties of the APES	c_{11}^{JT}	c_{12}^{JT}	c_E^{JT}	c_{44}^{JT}
E	$-\frac{8}{27} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$\frac{4}{27} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{2}{9} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	0
T	0	0	0	$-\frac{16}{27} \frac{na_0^2 F_T^2}{k_B T}$
OR	$-\frac{1}{54} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{1}{108} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{1}{72} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{4}{9} \frac{na_0^2 F_T^2}{k_B T}$

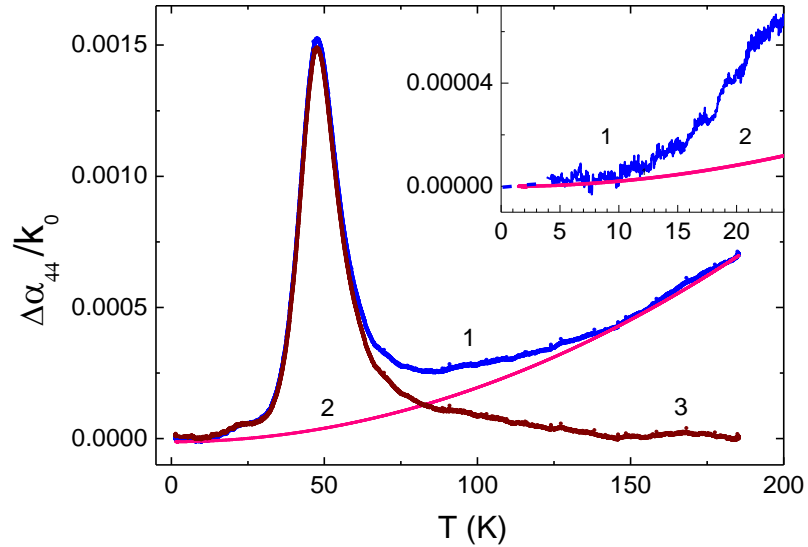


Рисунок 1 – Температурная зависимость затухания ультразвука в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ для моды c_{44} на 105 МГц. k_0 - волновое число.

Пик релаксационного поглощения расположенный при сравнительно высокой температуре ($T > 40$ К) указывает большое время релаксации и малое значение скорости релаксации при низких температурах. На рисунке 1, температурная зависимость поглощения ультразвука в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ (кривая 1) представлена как $\Delta\alpha_{44}/k_0 = [\alpha_{44}(T) - \alpha_{44}(T \rightarrow 0)]/k_0$, фоновое затухание составляет $\alpha_{44}^b(T) = 2.07 \cdot 10^{-8} T^{-2}$ (2), и ЯТ вклад

$\alpha_{44}^{JT} / k_0 = [\Delta\alpha_{44}^{JT}(T) - \alpha_{44}^b(T)] / k_0$ (3). Температурная зависимость времени релаксации τ ЯТ подсистемы может быть построена с использованием температурной зависимости затухания ультразвука $\Delta\alpha_\beta(T)$ и вычитанием фонового затухания $\Delta\alpha_\beta^b(T)$. Для расчета температурной зависимости релаксации было использовано следующее выражение (см, например, [11])

$$\tau(T) = \frac{1}{\omega} \left\{ \frac{\alpha_\beta^{JT}(T_1) \cdot T_1}{\alpha_\beta^{JT}(T) \cdot T} \pm \sqrt{\left[\frac{\alpha_\beta^{JT}(T_1) \cdot T_1}{\alpha_\beta^{JT}(T) \cdot T} \right]^2 - 1} \right\}, \quad (1)$$

где ω - циклическая частота волны, $\alpha_\beta^{JT} = \Delta\alpha_\beta - \Delta\alpha_\beta^b$, T_1 соответствует условию $\omega\tau=1$.

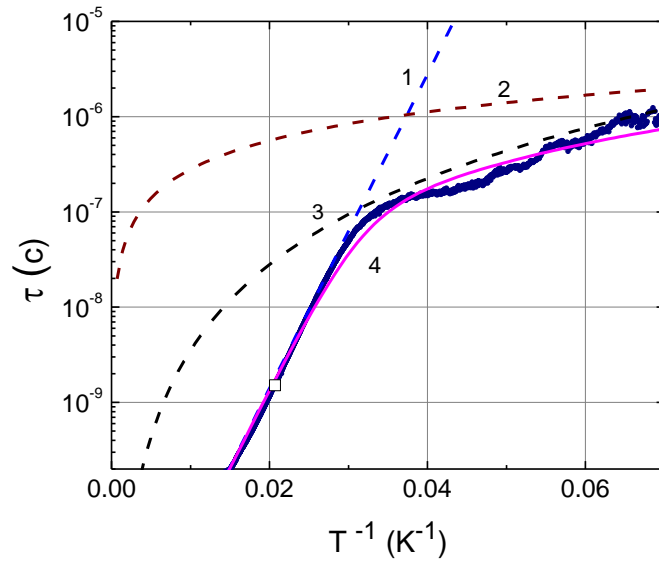


Рисунок 2 – Температурная зависимость времени релаксации в $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$, определенная с использованием данных, приведенных на рисунке

1.б. Темная сплошная линия - экспериментальные данные, кривая 1 - $\tau_a = 7 \cdot 10^{-13} \exp(380/T)$, 2 - $\tau_i = 2.8 \cdot 10^{-5} T^{-1}$, 3 - $\tau_R = 3.5 \cdot 10^{-3} T^{-3}$, 4 - суммарное время релаксации $\tau = (\tau_a^{-1} + \tau_i^{-1} + \tau_R^{-1})^{-1}$. Здесь и далее квадратный символ на рисунках соответствует $\omega\tau(T) = 1$.

Таблица 2 – Положения трех тетрагональных седловых точек в координатах

$$(Q_\theta, Q_\varepsilon, Q_\xi, Q_\eta, Q_\zeta). \quad Q_0^E = F_E / K_E$$

Q_1^E	Q_2^E	Q_2^E
$Q_0^E(1, 0, 0, 0, 0)$	$Q_0^E\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0, 0\right)$	$Q_0^E\left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0, 0\right)$

Таблица 3 – Положения четырех тригональных седловых точек в координатах $(Q_g, Q_\varepsilon, Q_\xi, Q_\eta, Q_\zeta)$. $Q_0^T = 2F_T / (3K_T)$

Q_1^T	Q_2^T	Q_3^T	Q_4^T
$Q_0^T (0, 0, 1, 1, 1)$	$Q_0^T (0, 0, -1, 1, -1)$	$Q_0^T (0, 0, 1, -1, -1)$	$Q_0^T (0, 0, -1, -1, 1)$

Выражения для расчета констант линейной вибронной связи записаны с учетом $(c_\beta^{JT})^T$ (приведенных в таблице 1) следующим образом [7]:

$$F_E^2 = 288 \frac{c_0 k_B \alpha_E^{JT}(T_1) \cdot T_1}{na_0^2 k_0}, \quad F_T^2 = 9 \frac{c_0 k_B \alpha_T^{JT}(T_1) \cdot T_1}{na_0^2 k_0}. \quad (3)$$

Таблица 4 – Положения шести орторомбических минимумов в координатах $(Q_g, Q_\varepsilon, Q_\xi, Q_\eta, Q_\zeta)$.

	Q_g	Q_ε	Q_ξ	Q_η	Q_ζ
Q_1^{OR}	$Q_{0,g}^{OR}$	0	0	0	$Q_{0,\zeta}^{OR}$
Q_2^{OR}	$Q_{0,g}^{OR}$	0	0	0	$-Q_{0,\zeta}^{OR}$
Q_3^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0,g}^{OR}$	0	$Q_{0,\zeta}^{OR}$	0
Q_4^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0,g}^{OR}$	0	$-Q_{0,\zeta}^{OR}$	0
Q_5^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$Q_{0,\zeta}^{OR}$	0	0
Q_6^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0,g}^{OR}$	$-Q_{0,\zeta}^{OR}$	0	0

Обсуждались три механизма релаксации для интерпретации экспериментальных данных: термическая активация ($\tau_a = \tau_0 \exp(V_0 / T)$), туннелирование

($\tau_t = (BT)^{-1}$), и двухфононный ($\tau_r = [(B / \Theta^2) T^3]^{-1}$) механизмы (см. Рисунок 2).

V_0 - энергия активации, τ_0^{-1} - частота попыток, B и Θ - константы размерностей $s^{-1}K^{-1}$ и K , соответственно. В случае орторомбических глобальных минимумов глубина седловых точек определяется по значению тетрагональной (E^E) и тригональной (E^T) энергий ЯТ стабилизации следующим образом [8]:

$$E_E = \frac{1}{2} \frac{F_E^2}{K_E}, \quad E_T = \frac{2}{3} \frac{F_T^2}{K_T}, \quad (2)$$

где K_E и K_T - тетрагональная и тригональная первичные силовые константы.

Энергия ЯТ стабилизации для орторомбических минимумов (т.е. глубина глобальных минимумов АП) определяется как

$$E^{OR} = E^T + V_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega_R, \quad (4)$$

где ω_R - радиальная вибронная частота. Ее можно принять равной локальной частоте колебаний тригонального типа ω_T . Значение $\omega_R = 100 \text{ см}^{-1}$ было использовано, как в [7]. Силовая константа K_T определяется произведением ω_R^2 и приведенной массой $\text{CrF}_8 M = (m_{\text{Cr}} : 8m_F) / (m_{\text{Cr}} + 8m_F) = 6.43 \cdot 10^{-23} \text{ Г}$. Соотношение первичных силовых констант должно соответствовать соотношению между соответствующими модулями упругости симметрии

$$\frac{K_E}{K_T} = \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{2} \right) / c_{44} \quad (5)$$

Положения орторомбических глобальных минимумов могут быть вычислены с использованием безразмерных параметров [9]

$$A = \frac{W_{ET}}{\sqrt{K_E K_T}}, \quad B = \frac{W_{ET} F_E}{K_E K_T}, \quad (6)$$

где W_{ET} является квадратичной константой вибронной связи. Очевидно,

$$W_{ET} = A \sqrt{K_E K_T}, \quad A/B = \sqrt{K_E K_T} / F_E. \quad (7)$$

Величины A определяются квадратным уравнением

$$\frac{E_{OR}}{E_E} = \frac{(A/B)^2 - (A/B)A + 1/4}{(1-A^2)} \quad (8)$$

После расчета безразмерных параметров A and B , положения первого орторомбического минимума определяются следующим образом

$$Q_1^{OR} = \left(-\frac{F_E (B - 2A^2)}{2K_E B (1 - A^2)}, 0, 0, 0, -\frac{F_T (2 - B)}{2K_T (1 - A^2)} \right) \quad (9)$$

Остальные пять минимумов могут быть получены с помощью с таблицы 4.

Величины экстремальных точек АП, константы вибронной связи и положения экстремальных точек (орторомбических минимумов и тригональных и тетрагональных седловых точек) были рассчитаны и приведены в таблицах 5 и 6. Два значения величин W_{ET} , $Q_{0\vartheta}^{OR}$, $Q_{0\zeta}^{OR}$ для одного набора (F_E , F_T) обусловлены двумя решениями квадратного уравнения (4) относительно A .

Таблица 5 – Энергии стабилизации для тетрагональных, тригональных и орторомбических экстремумов АП.

$E_E, \text{см}^{-1}$	$E_T, \text{см}^{-1}$	$E_{OR}, \text{см}^{-1}$
225	440	754

Таблица 6 – Константы вибронной связи F_E, F_T , параметры $Q_{0\beta}^{OR}, Q_{0\zeta}^{OR}, Q_0^E$ и Q_0^T необходимые для получения минимумов и седловых точек АП.

$F_E,$ дин	$F_T,$ дин	$W_{ET},$ дин/см	$Q_0^E, \text{Å}$	$Q_0^T, \text{Å}$	$Q_{0\beta}^{OR}, \text{Å}$	$Q_{0\zeta}^{OR}, \text{Å}$
$5.3 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-5}$	$-1.3 \cdot 10^4$	0.19	0.16	-0.17	0.41
		$2.3 \cdot 10^4$			1.0	0.83
$-5.3 \cdot 10^{-5}$	$-5.5 \cdot 10^{-5}$	$-1.3 \cdot 10^4$	-0.19	-0.16	0.17	-0.41
		$2.3 \cdot 10^4$			-1.0	-0.83
$5.3 \cdot 10^{-5}$	$-5.5 \cdot 10^{-5}$	$-1.3 \cdot 10^4$	0.19	-0.16	1.00	-0.83
		$2.3 \cdot 10^4$			-0.17	-0.41
$-5.3 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-5}$	$-1.3 \cdot 10^4$	-0.19	0.16	-1.00	0.83
		$2.3 \cdot 10^4$			0.17	0.41

В 4-й главе «Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ » аномалии в обоих c_{44} и c_E модах на температурных зависимостях поглощения ультразвука, указывают на орторомбическую симметрию глобальных минимумов АП (рисунок 3).

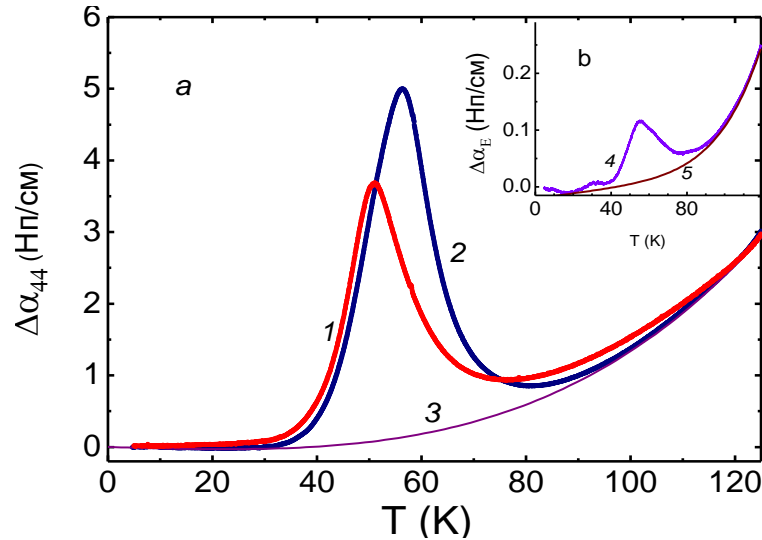


Рисунок 3 – Температурные зависимости поглощения ультразвука в $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$: c_{44} мода, на 17 и 53 МГц (кривые 1 и 2, соответственно), $(c_{11} - c_{12})/2$ E-мода на 54 МГц (кривая 4). Фоновые затухания представлены кривыми 3 и 5. $\Delta\alpha_\beta = \alpha_\beta(T) - \alpha_\beta(T_0)$, $T_0 = 5 \text{ К}$, $\beta = 44, E$.

На рисунке 4 показана температурная зависимость времени релаксации, определенная с использованием данных, приведенных на рисунке 3, кривыми 2 и 3.

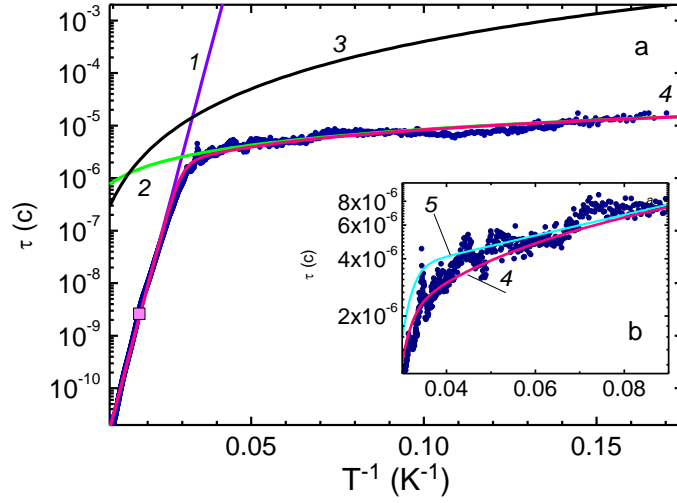


Рисунок 4 – Температурная зависимость времени релаксации в $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$. Кривая 1 - $\tau_a = 10^{-13} \exp(570/T)$, 2 - $\tau_i = 8.5 \cdot 10^{-5} T^{-1}$, 3 - $\tau_R = 0.4 \cdot T^{-3}$, 4 – суммарное время релаксации. Кривая 5 представляет другой вариант подгонки, а именно, с двумя механизмами активации $\tau = \{(10^{-13} \exp(570/T))^{-1} + [2.5 \cdot 10^{-6} \exp(12.5/T)]^{-1}\}^{-1}$.

Таблица 6 – Энергии стабилизации для тетрагональных, тригональных и орторомбических экстремумов АП в $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$.

E_E, cm^{-1}	E_T, cm^{-1}	E_{OR}, cm^{-1}
350	880	1290

Таблица 7 – Константы вибронной связи, квадратичная вибронная константа W_{ET} , параметры $Q_{0,g}^{OR}$, $Q_{0,\zeta}^{OR}$, Q_0^E и Q_0^T необходимые для получения орторомбических глобальных минимумов и седловых точек в $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$.

F_E, dyn	F_T, dyn	$W_{ET}, \text{dyn/cm}$	$Q_0^E, \text{Å}$	$Q_0^T, \text{Å}$	$Q_{0,g}^{OR}, \text{Å}$	$Q_{0,\zeta}^{OR}, \text{Å}$
$1.9 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$-3.3 \cdot 10^4$	0.125	0.15	-0.20	0.35
		$5.9 \cdot 10^4$				0.35
$-1.9 \cdot 10^{-4}$	$-1.2 \cdot 10^{-4}$	$-5.9 \cdot 10^4$	-0.125	-0.15	0.20	-0.35
		$3.3 \cdot 10^4$				-0.35
$1.9 \cdot 10^{-4}$	$-1.2 \cdot 10^{-4}$	$-3.3 \cdot 10^4$	0.125	-0.15	0.35	-0.59
		$5.9 \cdot 10^4$				-0.20
$-1.9 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$-3.3 \cdot 10^4$	-0.125	0.15	-0.35	0.59
		$5.9 \cdot 10^4$				0.20

Глубины седловых точек и орторомбических минимумов АП, их координаты и константы вибронной связи были рассчитаны с помощью подхода, описанного в главе 3. Результаты представлены в таблицах 6 и 7. Видно, что комплексы $\text{Ni}^{2+}\text{F}_8^-$ в CaF_2 имеют большие величины констант вибронной связи и более глубокие экстремумы АП, чем комплексы $\text{Cr}^{2+}\text{F}_8^-$ в матрице SrF_2 .

В 5-й главе «Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ », было показано, что в этом кристалле пик поглощения наблюдался в тетрагональной (c_E), тригональной (c_{44}) и продольной ($c_L = (c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$) модах, но при более низких температурах (см. рисунок 5).

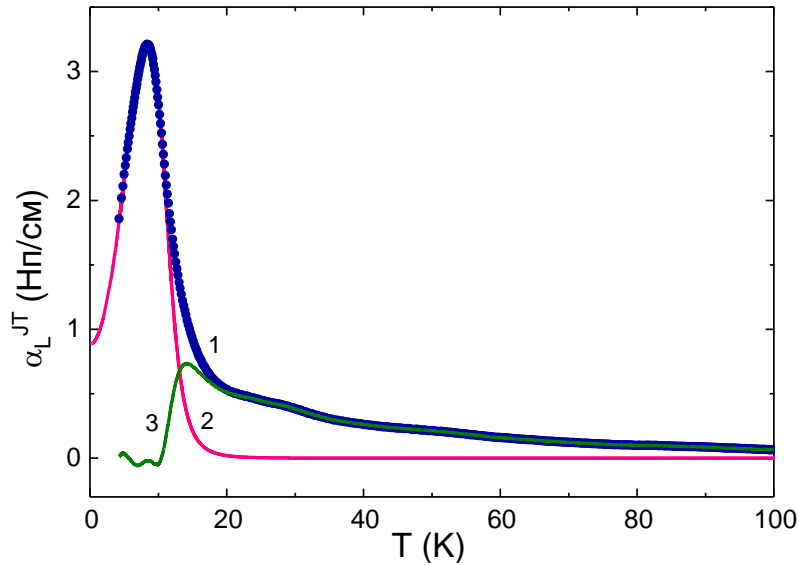


Рисунок 5 – Температурная зависимость ЯТ вклада в поглощение α_L^{JT} моды c_L измеренная на 54 МГц (кривая 1) в $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ и подгоночная кривая α_L^m (2) с $\alpha_L^{JT}(T_1) \cdot T_1 = 28.9 \text{ К} \cdot \text{Нп} \cdot \text{см}^{-1}$ и временем релаксации τ показанном на рисунке 6. Кривая 3 - $\Delta\alpha_L^{JT} = \alpha_L^{JT} - \alpha_L^m$ (α_L^m представлена кривой 2).

Чтобы определить энергию активации для комплексов $\text{Cr}^{2+}\text{F}_8^-$, мы выполнили моделирование вклада ЯТ подсистемы поглощение ультразвука с учетом всех трех механизмов релаксации, показанных на рисунке 6, и получили величину V_0 с помощью фитинга.

Параметры АП, рассчитанные с использованием процедуры, представленной в главе 3, приведены в таблицах 8 и 9.

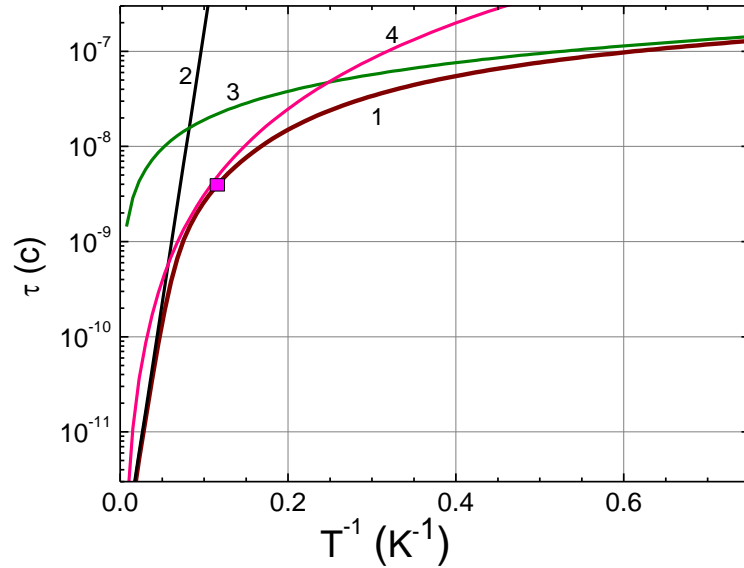


Рисунок 6 – Температурная зависимость времени релаксации в $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$.

Кривая 1 - $\tau_a = 3 \cdot 10^{-13} \exp(132/T)$, 2 - $\tau_t = 1.9 \cdot 10^{-7} T^{-1}$, 3 - $\tau_R = 3.1 \cdot 10^{-6} \cdot T^{-6}$, кривая 4 – суммарное время релаксации.

Таблица 8 – Энергии стабилизации для тетрагональных, тригональных и орторомбических экстремумов АП в $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$.

E_E, cm^{-1}	E_T, cm^{-1}	E_{OR}, cm^{-1}
208	538	697

Таблица 9 – Константы вибронной связи, квадратичная вибронная константа, параметры Q_{0g}^{OR} , $Q_{0\zeta}^{OR}$, Q_0^E и Q_0^T необходимые для расчета орторомбических глобальных минимумов и седловых точек в $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$.

F_E, dyn	F_T, dyn	$W_{ET}, \text{dyn/cm}$	$Q_0^E, \text{Å}$	$Q_0^T, \text{Å}$	$Q_{0g}^{OR}, \text{Å}$	$Q_{0\zeta}^{OR}, \text{Å}$
$8.2 \cdot 10^{-5}$	$8.8 \cdot 10^{-5}$	$-2.6 \cdot 10^4$	0.10	0.12	-0.13	0.25
		$5.2 \cdot 10^4$			0.22	0.42
$-8.2 \cdot 10^{-5}$	$-8.8 \cdot 10^{-5}$	$-2.6 \cdot 10^4$	-0.10	-0.12	0.13	-0.25
		$5.2 \cdot 10^4$			-0.22	-0.42
$8.2 \cdot 10^{-5}$	$-8.8 \cdot 10^{-5}$	$-2.6 \cdot 10^4$	0.10	-0.12	-0.13	-0.42
		$5.2 \cdot 10^4$			0.22	-0.25
$-8.2 \cdot 10^{-5}$	$8.8 \cdot 10^{-5}$	$-2.6 \cdot 10^4$	-0.10	0.12	0.13	0.25
		$5.2 \cdot 10^4$			-0.22	0.42

В 6-й главе «Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$ », для более удобного представления экспериментальных данных обсуждение было проведено в терминах действительной

и мнимой частей динамических модулей упругости. Аномалии релаксационного типа наблюдались во всех изученных модулях c_L , c_{44} и c_E . Следовательно, мы можем заключить, что Cu^{2+}F_8 ЯТ комплекс обладает орторомбическими глобальными минимумами АП и описывается квадратичной $T \otimes (e + t_2)$ задачей ЭЯТ. Оптимальным вариантом является построение температурной зависимости с помощью обоих методов. Они основаны на абсолютно независимых измерениях. Более того, данные обрабатываются с использованием различных формул, которые дают хороший инструмент для проверки полученных результатов.

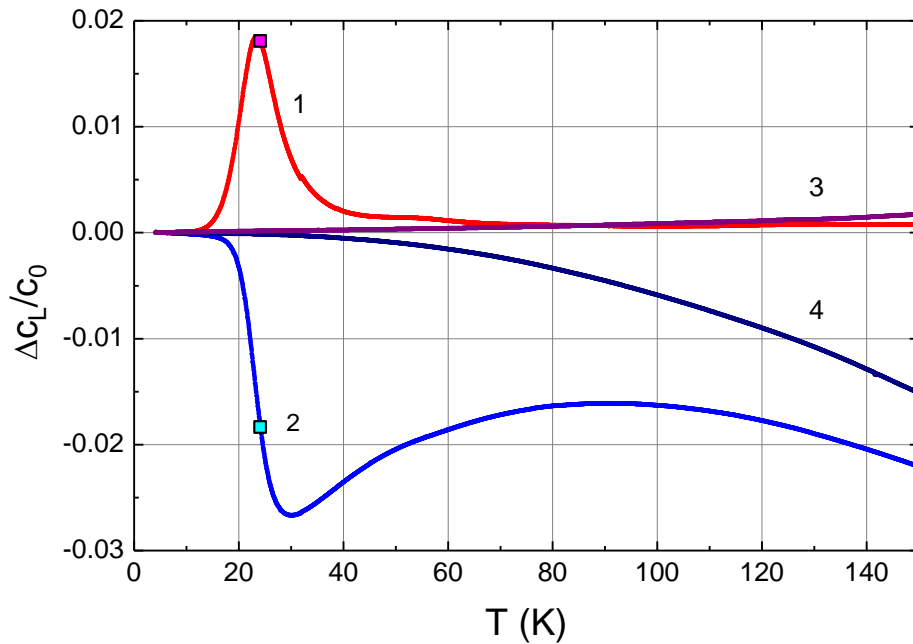


Рисунок 7 – Температурные зависимости мнимой (кривая 1) и действительной (2) частей модуля упругости c_L на 55.8 МГц в $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$. Те же зависимости, но измеренные на 55.5 МГц в номинально чистом CaF_2 показаны кривыми 3 и 4. $\Delta c_L = c_L(T) - c_0$, $c_0 = c_L(T_0)$, $T_0 = 4.2$ К.

$$\Delta c_L = c_L(T) - c_0, \quad c_0 = c_L(T_0), \quad T_0 = 4.2 \text{ К.}$$

Температурная зависимость времени релаксации может быть получена с использованием как мнимой, так и действительной частей модуля упругости, используя следующие выражения [11]:

$$\tau(T) = \frac{1}{\omega} \left\{ \frac{\text{Im} c_{\beta}^{JT}(T_1) \cdot (T_1)}{\text{Im} c_{\beta}^{JT}(T) \cdot (T)} \pm \sqrt{\left[\frac{\text{Im} c_{\beta}^{JT}(T_1) \cdot (T_1)}{\text{Im} c_{\beta}^{JT}(T) \cdot (T)} \right]^2 - 1} \right\}, \quad (10)$$

$$\tau(T) = \frac{1}{\omega} \left\{ \sqrt{\frac{\text{Re} c_{\beta}^{JT}(T_1) \cdot (T_1)}{\text{Re} c_{\beta}^{JT}(T) \cdot (T)}} - 1 \right\}. \quad (11)$$

Зависимости $\tau(T)$, рассчитанные с использованием уравнений (10) и (11), записанных для $\beta=L$, показаны на рисунке 8. Можно видеть, что обе зависимости почти совпадают при температурах ниже 25 К, когда система полностью находится в основном состоянии.

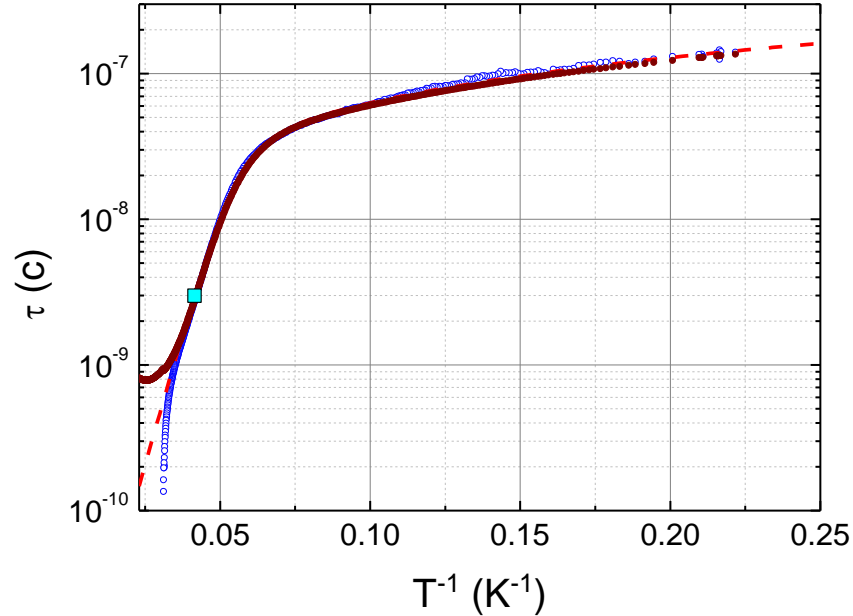


Рисунок 8 – Температурная зависимость времени релаксации, основанная на

$\text{Re}[c_L^{JT}(T)]/c_0$ (коричневые символы) и $\text{Im}[c_L^{JT}(T)]/c_0$ (синие) на 55.8 МГц в

$\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$. Пунктирная кривая - моделирование времени релаксации

$$\tau = (\tau_a^{-1} + \tau_i^{-1} + \tau_R^{-1})^{-1}, \text{ где } \tau_a = 3 \cdot 10^{-12} \exp(170/T), \tau_i = 6.5 \cdot 10^{-7} T^{-1},$$

$$\tau_R = 2 \cdot 10^{-3} \cdot T^{-3}.$$

Воспроизводя процедуру, описанную в главе 3, были получены значения параметров АП. Они представлены в таблицах 10 и 11.

Таблица 10 – Энергии стабилизации для тетрагональных тригональных и орторомбических экстремумов АП в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$.

E_E, cm^{-1}	E_T, cm^{-1}	E_{OR}, cm^{-1}
479	$1.11 \cdot 10^3$	$1.30 \cdot 10^3$

Были установлены два параметра, которые не зависят от концентрации. Это время релаксации и отношение констант линейной вибронной связи. Первый определяется по форме кривых поглощения или дисперсии, но не по

масштабу их изменения. Второй параметр не зависит от концентрации, поскольку обе константы связи имеют линейную зависимость от концентрации ЯТ комплексов и их отношение от концентрации не зависит. Наиболее важные параметры приведены в таблице 12.

Таблица 11 – Константы вибронной связи, квадратичная вибронная константа W_{ET} , параметры Q_{0g}^{OR} , $Q_{0\zeta}^{OR}$, Q_0^E и необходимые для расчета орторомбических глобальных минимумов и седловых точек в $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$.

F_E , dyn	F_T , dyn	W_{ET} , dyn/cm	Q_0^E , Å	Q_0^T , Å	Q_{0g}^{OR} , Å	$Q_{0\zeta}^{OR}$, Å
$1.08 \cdot 10^{-4}$	$1.10 \cdot 10^{-4}$	$-1.55 \cdot 10^4$ $3.9 \cdot 10^4$	0.18	0.20	-0.18 0.30	0.38 0.62
$-1.08 \cdot 10^{-4}$	$-1.10 \cdot 10^{-4}$	$-1.6 \cdot 10^4$ $3.9 \cdot 10^4$	-0.18	-0.20	0.18 -0.30	-0.38 -0.62
$1.08 \cdot 10^{-4}$	$-1.10 \cdot 10^{-4}$	$-3.9 \cdot 10^4$ $1.6 \cdot 10^4$	0.18	-0.20	0.30 -0.18	-0.62 -0.38
$-1.08 \cdot 10^{-4}$	$1.10 \cdot 10^{-4}$	$-3.9 \cdot 10^4$ $1.6 \cdot 10^4$	-0.18	0.20	-0.30 0.18	0.62 0.38

Таблица 12 – Энергии активации и линейные вибронные константы ЯТ комплексов в исследованных кристаллах.

Кристалл	Конфигурация	Основное состояние	V_0 , cm^{-1}	$ F_T / F_E $	$ F_T $, dyn
$\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ [A2]	d^4	${}^5T_{2g}(e_g^2 t_{2g}^2)$	91.7	1.07	$0.88 \cdot 10^{-4}$
$\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$ [A1]	d^9	${}^2T_{2g}(e_g^4 t_{2g}^5)$	118	1.02	$1.1 \cdot 10^{-4}$
$\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ [A5]	d^4	${}^5T_{2g}(e_g^2 t_{2g}^2)$	264	1.04	$0.55 \cdot 10^{-4}$
$\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ [A4]	d^8	${}^3T_{1g}(e_g^4 t_{2g}^4)$	394	1.07	$1.2 \cdot 10^{-4}$

В заключение, представлены результаты диссертации. Были исследованы кристаллы со структурой флюорита с замещением катиона 3d-ионами: $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$, $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$, $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$, и $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ с использованием ультразвуковой методики. Температурные зависимости поглощения и фазовой скорости были измерены в диапазоне 4-170 К. Аномалии релаксационной природы, обусловленные подсистемой ЯТ кубических комплексов $3d^{2+}F_8$ наблюдались во всех кристаллах во всех изученных нормальных модах, свидетельствуя о

квадратичной $T \otimes (e + t_2)$ задаче ЭЯТ и АП с орторомбическими глобальными минимумами.

1. Получена и смоделирована температурная зависимость времени релаксации с учетом трех механизмов.

2. Проявление ЭЯТ в монокристалле $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ оказалось аналогичным проявлению в $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$, хотя ЯТ ионы и сами кристаллы различны. В обоих кристаллах релаксационные аномалии наблюдались при относительно высоких температурах (приблизительно 56 и 44 К на частоте около 55 МГц, соответственно). Более высокая температура расположения пика означает более низкую скорость релаксации и более высокий потенциальный барьер.

3. В монокристалле $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ пик релаксационного поглощения наблюдался при относительно низких температурах (приблизительно 8.7 К на частоте около 54 МГц). Более низкая температура расположения пика означает более высокую скорость релаксации и более низкий потенциальный барьер (или энергию активации).

4. В монокристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}^{2+}$ проявление ЭЯТ оказалось промежуточным случаем между $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$, с одной стороны, и $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ с $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$, с другой: релаксационные аномалии наблюдаются примерно при 24 К (на частоте около 56 МГц) в сравнении с $\text{CaF}_2:\text{Cr}^{2+}$ (8.7 К), $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ (56 К) и $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ (44 К).

5. Наконец, можно сделать вывод, что в исследованных кристаллах: (i) константы линейной вибронной связи, характеризующие ЯТ центры, приблизительно равны, если говорить об их абсолютных значениях; (ii) энергия активации, характеризующая кристаллы, находится в диапазоне 90-400 см^{-1} ; (iii) порядок абсолютного значения констант линейной вибронной связи F_E и F_T является 10^{-4} дин.

Дальнейшие перспективы развития темы

Дальнейшие разработки лежат как в области фундаментальных, так и прикладных исследований. Нерешенной фундаментальной проблемой является изучение АП в других матрицах типа флюорита с более тяжелыми катионами, а именно CdF_2 и BaF_2 , легированных 3d-металлами. В результате будет найден кристалл с высокими барьерами и низкой скоростью релаксации. Такой кристалл может иметь практическое применение в качестве элементной базы квантовых компьютеров.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jahn, H. A. Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states I—Orbital degeneracy / H. A. Jahn, E. Teller // Proc. R. Soc. London. Ser. A—Math. Phys. Sci. — 1937. — V. 161 — № 905. — P. 220–235.

2. Avram, N. M. Optical Properties of 3d-Ions in Crystals: Spectroscopy and Crystal Field Analysis / N. M. Avram, M. G. Brik (Eds.). – Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2013. – 268 p.
3. Hoffmann, S. K. Molecular structure and dynamics of off-center Cu^{2+} ions and strongly coupled $\text{Cu}^{2+} - \text{Cu}^{2+}$ pairs in BaF_2 crystals: Electron paramagnetic resonance and electron spin relaxation studies / S. K. Hoffmann, J. Goslar, S. Lijewski, V. A. Ulanov // J. Chem. Phys. – 2007. – V. 127 – № 12. – P. 124705.16.
4. Luthi B. Physical Acoustics in the Solid State / B. Luthi. – Berlin, Springer. – 2005.
5. Sturge M. D. The Jahn-Teller Effect in Solids / F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich // New York, London: Academic Press. – 1968. pp. 91–211 .
6. Gudkov, V. V. Ultrasonic evaluation of the Jahn–Teller effect parameters. Application to ZnSe:Cr^{2+} / V. V Gudkov, I. B. Bersuker, I. V. Zhevstovskikh, Y. V. Korostelin, A. I. Landman // J. Phys. Condens. Matter – 2011. – V. 23 – № 11. – P. 115401.
7. Averkiev N. S. Fluorite structure, chemistry and application / N. S. Averkiev, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, I. V. Zhevstovskikh, M. N. Sarychev, S. Zherllitsyn, Sh. Yasin, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, V. T. Surikov // The Jahn-Teller effect in elastic moduli of cubic crystals: general theory and application to strontium fluorite doped with chromium ions. Nova Sci. Publ. Inc., New York. – 2019. P. 111–159.
8. Bersuker I. B. The Jahn–Teller Effect / I. B. Bersuker. – Cambridge, Cambridge Univ. Press. – 2006.
9. Bersuker, I. V. Jahn-Teller effect for T terms / I. V. Bersuker, V. Z. Polinger // Sov. Phys-JETP. – 1974. – V. 39 – № 6. – P. 1023–1029.
10. Zener C. Elasticity and Anelasticity of Metals / C. Zener. – Univ. Chicago, Chicago Press. – 1948.
11. Gudkov V. V. Ultrasonic consequences of the Jahn–Teller Effect. In The Jahn–Teller Effect Fundamentals and Implications for physics and chemistry edited by H. Koppel, D. R. Yarkony, H. Barentzen, pp. 743. Springer, New York, 2009.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и

Аттестационным советом УрФУ:

- A1. Sarychev, M. N. Adiabatic Potential Energy Surface of Jahn–Teller Cu^{2+} Complexes in a Fluorite Crystal / M. N. Sarychev, **W. A. L. Hosseney**, I. V. Zhevstovskikh, V. A. Ulanov, A. V. Egranov, V. T. Surikov, N. S. Averkiev,

- V. V. Gudkov // J. Exp. Theor. Phys. – 2022. – 135 (4). – Pp. 473–483. 0.68 п.л/0,08 п.л. (Scopus and Web of Science)
- Сарычев, М. Н. Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ в кристалле флюорита / М. Н. Сарычев, У. А. Л. Хоссени, И. В. Жевстовских, В. А. Уланов, А. В. Егранов, В. Т. Суриков, Н. С. Аверкиев, В. В. Гудков // ЖЭТФ. – 2022. – 162(4). – С. 509–521. 0.81 п.л/0,1 п.л.
- A2. Sarychev, M. N. Manifestation of the Jahn–Teller effect subject to quadratic $T \otimes (e+t_2)$ problem in ultrasonic attenuation. Case study of $\text{CaF}_2:\text{Cr}$ crystal with isovalent and aliovalent substitution / M. N. Sarychev, **W. A. L. Hosseney**, I. V Zhevstovskikh, V. A. Ulanov, G. S. Shakurov, A. V Egranov, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, V. V Gudkov // J. Phys.: Condens. Matter – 2022. – 34 (22). – Pp. 225401. 0.75 п.л/0,08 п.л. (Scopus and Web of Science)
- A3. Sarychev, M. N. Contribution of the distorted Jahn-Teller complexes to the elastic moduli in fluorite crystal / M. N. Sarychev, **W. A. L. Hosseney**, V. A. Ulanov, A. V. Egranov, V. T. Surikov, I. V. Zhevstovskikh, N. S. Averkiev, V. V. Gudkov // AIP Conference Proceedings. – 2022. – 2466. – Pp. 030013. 0.43 п.л/0,05 п.л. (Scopus)
- A4. Sarychev, M. N. Adiabatic potential energy surface of the Jahn-Teller complexes in $\text{CaF}_2:\text{Ni}^{2+}$ crystal determined from experiment on ultrasonic attenuation / M. N. Sarychev, **W. A. L. Hosseney**, A. S. Bondarevskaya, I. V. Zhevstovskikh, A. V. Egranov, O. S. Grunskiy, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, V. V. Gudkov // J. Alloys Compd. – 2020. – 848. – Pp. 156167. 0.43 п.л/0,04 п.л. (Scopus and Web of Science)
- A5. Sarychev, M. N. Adiabatic potential energy surface of the Jahn-Teller complexes in $\text{SrF}_2:\text{Cr}^{2+}$ crystal / M. N. Sarychev, **W. A. L. Hosseney**, A. S. Bondarevskaya, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, V. T. Surikov, I. V. Zhevstovskikh, N. S. Averkiev, V. V. Gudkov // AIP Conference Proceedings. – 2020. – 2313. – Pp. 030071. 0.5 п.л/0,05 п.л. (Scopus)

ХОССЕНИ Уиссам Адел Лотфи
АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ
В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА

Автореферат дисс. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____ Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 1.

Заказ №. ____ Тираж ____ экз.

Типография _____