

А К А Д Е М И Я Н А У К С С С Р

С И Б И Р С К О Е О Т Д Е Л Е Н И Е

И Н С Т И Т У Т Ф И З И К И И М . Л . В . К И Р Е Н С К О Г О

П р е п р и н т И Ф С О - 1 0 3 Ф

В . Ф . Ш а б а н о в , А . Н . В т ю р и н , С . Я . В е т р о в

П Р И М Е Н Е Н И Е Т Е О Р И И С И М М Е Т Р И И К И З У Ч Е Н И Ю
О П Т И Ч Е С К И Х С В О Й С Т В Н Е С О Р А З М Е Р Н Ы Х С Т Р У К Т У Р
С Е Г Н Е Т О Э Л Е К Т Р И Ч Е С К И Х К Р И С Т А Л Л О В

К р а с н о я р с к , 1 9 7 9

055(02)5

УДК 548.0:532.783

Теоретико-групповое рассмотрение оптических свойств кристаллов с несоразмерными фазами затруднено из-за отсутствия трансляционной инвариантности их структуры в трехмерном пространстве.

В настоящей работе предлагается способ описания симметрии оптических свойств кристаллов с модулированной структурой. Для несоразмерной фазы кристаллов типа K_2SeO_4 найдены виды тензоров комбинационного рассеяния и генерации второй оптической гармоники. Результаты совпадают с полученными методом теории возмущений и находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Ответственный за выпуск Втюрин А.Н.

© Институт физики, Красноярск, 1979 г.

§ I. ВВЕДЕНИЕ

Теоретико-групповые методы, позволяющие эффективно учесть свойства симметрии кристаллов широко применяются при решении многих задач физики твердого тела. Их основным достоинством является возможность получения точных результатов из анализа самых общих свойств вещества, не связанных с какой-либо моделью.

Анализ свойств твердых тел сильно облегчается наличием развитой теории пространственных групп, описывающих симметрию идеального кристалла. Однако в последнее время возрос интерес к твердым телам, в которых отсутствует трехмерная периодическая инвариантность. Отклонение от идеального строения в кристаллах может быть обусловлено тепловыми колебаниями решетки, волнами зарядовой или спиновой плотности и конденсацией мягкой моды в точке, не кратной размеру первой зоны Бриллюэна. Последний случай является наименее изученным, поскольку лишь недавно был обнаружен большой ряд веществ с подобными структурами (например, $K_2PbCl(NO_2)_6$ [1], K_2VedO_4 [2], $(NH_4)_2BeF_4$ [3], $(ND_4)_2BeF_4$ [4], $RbLiSO_4$ [5], Rb_2ZnCl_4 [6], Rb_2ThBr_4 [7]).

В отличие от тепловых колебаний здесь смещения, вызывающие изменение симметрии, являются статическими и поэтому иначе влияют на оптические свойства объекта.

В настоящей работе рассматривается способ описания симметрии периодически модулированных структур и её влияния на оптические свойства. Основное внимание уделяется комбинационному рассеянию света и генерации второй оптической гармоники.

§ 2. СИММЕТРИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИ МОДУЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР.

2а. Общее рассмотрение.

Периодически модулированная структура характеризуется тем, что структурные единицы отклонены от узлов идеальной кристаллической решетки, причём это отклонение обладает пространственной симметрией, т.е. является периодическим возмущением. Таким образом, если в исходной структуре положения атомов задаются векторами:

$$\vec{R}_0(\vec{A}) = \vec{n} + \vec{r}_0(\frac{\mu}{\alpha}), \quad (2.1)$$

где $\vec{n} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$, n_1, n_2, n_3 - целые числа, $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ - элементарные трансляции исходной структуры, μ - номер молекулярной группировки, α - номер атома в молекулярной группе и $\vec{r}_0(\frac{\mu}{\alpha})$ - вектор, определяющий положения атома α группы μ в элементарной ячейке, то в модулированной фазе их положение описывается набором векторов:

$$\vec{R}(\vec{A}) = \vec{R}_0(\vec{A}) + \vec{u}(\vec{A}), \quad (2.2)$$

где поле смещений \vec{u} определяется выражением:

$$\vec{u}(\vec{A}) = \sum_{\{\vec{q}\}} \vec{f}(\vec{A}) \exp i \vec{q} \vec{n}. \quad (2.3)$$

Здесь $\{\vec{q}\}$ - набор векторов из первой зоны Бриллюэна исходной фазы, исключая $\vec{q} = 0$, \vec{f} - амплитуда модуляции. Значение $\vec{q} = 0$ исключено, чтобы все смещения были модулированы.

В том случае, если все \vec{q} принадлежат обратной решетке исходной структуры, то модуляция будет соразмерной и её период будет кратен какому-либо из периодов исходной структуры.

Возникновение подобной модуляции происходит при переходе в сегнетоэлектрическую фазу в несобственных сегнетоэлектриках [8]. Если \vec{q} не принадлежит обратной решетке $\Lambda_3^*(\vec{q} \in \Lambda_3^*)$, то возникающая модуляция будет несоразмерной.

Наличие этих периодических возмущений проявляется в возникновении дополнительных рефлексов на дифракционной картине рассеяния рентгеновских лучей либо нейтронов в точках, соответствующих волновым векторам \vec{q} [2,4,7]. Согласно [9], интерпретация таких структур с помощью трехмерных пространственных групп в принципе возможна, однако усложняется необходимостью введения сверхструктуры с элементарными ячейками макроскопических размеров. Пространственная группа такого кристалла не может быть трехмерной и для её описания в [9] предложено ввести дополнительные координаты, связанные со смещением волны модуляции (2.3) относительно исходной структуры на вектор \vec{d} . Размерность нового пространства равна $3+d$, где d - число линейно-независимых векторов \vec{q} ($d \leq 3$). Его базис определяется векторами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ и набором $\{\vec{q}_i\}$. Причём все \vec{q} можно представить как линейные комбинации $\{\vec{q}_i\}$, а \vec{d} - как линейные комбинации $\{\vec{q}_i\}$. Тогда поле векторов \vec{u} , смещенное на \vec{d} относительно исходной структуры, описывается выражением:

$$\vec{u}(\vec{A})_{\vec{d}} = \sum_{\{\vec{q}\}} \vec{f}(\vec{A}) \exp i \vec{q} (\vec{n} - \vec{d}). \quad (2.4)$$

В $3+d$ - мерном пространстве вектору $\vec{u}_{\vec{d}}$ будет соответствовать вектор $(\vec{u}_{\vec{d}}, \vec{d})$.

В соответствии с этим для описания симметрии несоразмерной фазы естественно расширить допустимые преобразования, добавив к трехмерным преобразованиям в пространстве V_3 , d -мерные в пространстве V_d .

Если проводить описание в трехмерном пространстве V_3 и рассматривать V_d как его подпространство, то V_3 становится неевклидовым. Чтобы этого не случилось, введем в рассмотрение пространство $V_3 \otimes V_d$.

Согласно (2.4), каждому вектору $\bar{R}(\vec{R})$ из V_3 ставится в соответствие вектор

$$(\bar{R}(\vec{R})_d, d), \quad \text{где}$$

$$\bar{R}(\vec{R})_d = \bar{R}_3(\vec{R}) + d(\vec{R})_d. \quad (2.5)$$

В пространстве $V_3 \otimes V_d$ группа симметрии любой структуры является подгруппой прямого произведения:

$$E(3) \otimes E(d), \quad (2.6)$$

где $E(3)$ и $E(d)$ — евклидовы группы трех- и d -мерного пространств соответственно. Тогда произвольный элемент симметрии $3+d$ -мерной решетки можно представить в виде [10]:

$$g = (g_3, g_d), \quad (2.7)$$

где $g_3 \in E(3)$, $g_d \in E(d)$; а его действие на вектор (\bar{X}, \bar{Y}) :

$$\begin{aligned} (g_3, g_d)(\bar{X}, \bar{Y}) &= (g_3 \bar{X}, g_d \bar{Y}) = \\ &= (R_3 \bar{X} + \vec{p}_3, R_d \bar{Y} + \vec{p}_d), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где R_3 и R_d — элементы точечной группы в трех и d -мерном пространствах, а \vec{p}_3, \vec{p}_d — соответствующие им непрямые трансляции.

Тогда $(3+d)$ -мерная группа симметрии G образована теми элементами g , для которых выполняется равенство:

$$g(\bar{R}(\vec{R})_d, d) = (\bar{R}(\vec{R})_d, d). \quad (2.9)$$

Согласно [9], это справедливо при следующих условиях:

$$g_3 \in G_3, \quad (2.10)$$

где G_3 — пространственная группа исходной структуры.

$$R_3 \bar{f}(\vec{R}) = \bar{f}(\vec{R}'), \quad (2.11)$$

$$R_d \vec{q} = R_3 \vec{q}, \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} R_3 \bar{f}(\vec{R}'_d) &= \bar{f}(\vec{R}'_d) \exp i \vec{q} [R_3 \bar{R}(\vec{R})_d + \\ &+ \vec{p}_3 - \bar{R}(\vec{R}'_d) - \vec{p}_d]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Формулы (2.10)–(2.13) определяют элементы подгруппы вращений группы G .

Обозначим $\Delta \vec{n}$ проекцию элементарной трансляции \vec{n} исходной структуры на V_d , тогда подгруппа элементарных трансляций группы G образована векторами

$$(\vec{n}, \Delta \vec{n}), (\vec{0}, \vec{d}). \quad (2.14)$$

Равенства (2.10)–(2.14) полностью определяют $(3+d)$ -мерную пространственную группу G модулированной фазы. Для перехода в трехмерное пространство необходимо спроектировать группу G на V_3 .

Получаемый набор элементов симметрии в трехмерном пространстве может и не являться группой.

26. Симметрия структур типа $K_2 SeO_4$

Большинство известных к настоящему времени сегнетоэлектриков, обладающих несоразмерной фазой, в параэлектрической фазе изоморфны кристаллу $K_2 SeO_4$, структура которого подробно описана в [2]. Симметрия парафазы описывается пространственной группой $P6mm$. При переходе в несоразмерную фазу из пара-

электрической наблюдается конденсация мягкой моды с волновым вектором

$$q = \pm \frac{1 \cdot b}{l} a^* \quad (2.15)$$

(температура этого перехода в дальнейшем будет обозначаться T_1). Величина l равна 2 для $(NH_4)_2 BeF_4$, $(ND_4)_2 BeF_4$ [4] и 3 для $K_2 SeO_4$, $Rb_2 ZnCl_4$, $Rb_2 ZnBr_4$ [2,7]. Величина b плавно изменяется в несоизмерной фазе, оставаясь значительно меньше 1, и становится равной 0 при переходе в сегнетофазу (температура перехода T_0). Симметрия сегнетофазы $R\bar{3}c2_1$. Согласно проведенному выше общему рассмотрению и с учётом (2,15), симметрия несоизмерной фазы будет определяться четырёхмерной пространственной группой ($d = 1$). Исходной структурой является структура парафазы. Её пространственная группа G_0 состоит из подгруппы вращений:

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \middle| (0, 0, 0) \right\} \sim E, \quad (2.16a)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \middle| \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2} \right) \right\} \sim C_x, \quad (2.16б)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \middle| \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right) \right\} \sim C_y, \quad (2.16в)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \middle| (0, 0, \frac{c}{2}) \right\} \sim C_z, \quad (2.16г)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \middle| (0, 0, 0) \right\} \sim L, \quad (2.16д)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \middle| \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2} \right) \right\} \sim \sigma_x, \quad (2.16е)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \middle| \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right) \right\} \sim \sigma_y, \quad (2.16ж)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & -I \end{pmatrix} \middle| \left(0, 0, \frac{c}{2} \right) \right\} \sim \sigma_z. \quad (2.16з)$$

и подгруппы трансляций:

$$(n_1 a, n_2 b, n_3 c). \quad (2.17)$$

Структура исходной фазы наиболее подробно определена для $K_2 SeO_4$. Как и во всех этих веществах, она образована как отдельными ионами (K^+ , Nb^{5+}), так и молекулярными группировками (NH_4^+ , Nb_5^+ , BeF_4^{2-} , SeO_4^{2-} , $ZnCl_4^{2-}$, $ZnBr_4^{2-}$), которые являются слабо искаженными тетраэдрами, Отдельные ионы и центры тетраэдрических групп лежат в частном положении (на плоскостях симметрии σ_1). Часть атомов тетраэдра (для $K_2 SeO_4$ это O(3) и O(4)) также находится в этой плоскости, и остальные (O(1) и O(2)) - в общем положении. Колебание, соответствующее мягкой моде, имеет сложный характер и представляет собой смещение отдельных ионов и тетраэдрических групп как целого вдоль оси c , и повороты тетраэдров вокруг оси b [2]. Для определения симметрии новой фазы обычно проводят анализ одной из подрешеток (K^+ или SeO_4^{2-}). Поскольку группы SeO_4^{2-} имеют и ориентационные, и трансляционные степени свободы, то для общности рассмотрим подрешетку SeO_4^{2-} . В дальнейшем μ будет нумеровать группы SeO_4^{2-} , $\alpha=0$ соответствует атому в этой группе, и $\alpha=1,2,3,4$ - атомам кислорода. Тогда при $\alpha=0$ имеем [2]:

$$\vec{f}(\vec{R}) = \vec{F}(\mu, 0) \exp i \vec{q} \vec{R}_0(\vec{R}) \quad (2,18)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{F}(1,0) &= (0,0, F_4), \\ \vec{F}(2,0) &= (0,0, -F_4), \\ \vec{F}(3,0) &= (0,0, -F_4), \\ \vec{F}(4,0) &= (0,0, F_4), \end{aligned} \quad (2,19)$$

и при $\delta \neq 0$:

$$\vec{f}(\vec{R}) = \vec{F}(\mu, \delta) \exp i \vec{q} \vec{R}_0(\vec{R}) \quad (2,20)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{F}(1,\delta) &= (F_2, 0, F_1 + F_3), \\ \vec{F}(2,\delta) &= (-F_2, 0, -F_1 + F_3), \\ \vec{F}(3,\delta) &= (F_2, 0, -F_1 + F_3), \\ \vec{F}(4,\delta) &= (-F_2, 0, F_1 + F_3), \end{aligned} \quad (2,21)$$

здесь величины F_i описывают форму колебания, соответствующего мягкой моде в парафазе и, следовательно, симметрию смещений атомов при переходе в несоразмерную фазу. Производя анализ выражений (2.18-2.21) на основе полученных ранее правил (2.10) - (2.14) с использованием (2.15), получим, что при $\delta \neq 0$ (в несоразмерной фазе) четырехмерная пространственная группа симметрии образована элементами:

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix} (0, 0, 0, 0) \right\}, \quad (2,22a)$$

$$(n_1 a, n_2 b, n_3 c, n_4 a), \quad (2,22b)$$

$$(0, 0, 0, \frac{3n_5 a}{1-\delta}), \quad (2,22b)$$

Отсутствие элементов подгруппы вращений (за исключением элемента идентичности) связано с тем, что уравнение (2,13) не имеет общих решений при $\delta=0$ и $\delta \neq 0$. При $\delta=0$ (сегнетоэлектрическая фаза) получим:

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix} (0, 0, 0, 0) \right\}, \quad (2,23a)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I \end{pmatrix} (0, 0, \frac{c}{2}, 0) \right\}, \quad (2,23b)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} -I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I \end{pmatrix} (\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2}, \frac{3a}{2}) \right\}, \quad (2,23b)$$

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix} (\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0, \frac{3a}{2}) \right\}, \quad (2,23г)$$

$$(n_1 a, n_2 b, n_3 c, n_4 a), \quad (2,23д)$$

$$(0, 0, 0, 3n_5 a), \quad (2,23e)$$

Проектируя полученные четырехмерные пространственные группы в трехмерное пространство, получим в несоразмерной фазе:

$$\left\{ \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & a & t \end{pmatrix} \right\} (0, 0, 0), \quad (2.24a)$$

$$(0, n_2 b, n_3 c), \quad (2.24b)$$

что соответствует отсутствию элементов вращательной симметрии (кроме E) и трансляционной инвариантности вдоль оси a .

В сегнетофазе получаем набор элементов, образующих пространственную группу $Pna2_1$ с утроением элементарной трансляции вдоль оси a , что совпадает с известными ранее данными и подтверждает правильность проведенного рассмотрения. Если аналогичным образом рассмотреть подрешётку ионов K^+ , то получаемая четырехмерная пространственная группа в несоответственной фазе будет более высокосимметричной. Это связано с отсутствием у них вращательных степеней свободы. Полная группа симметрии является пересечением групп симметрии каждой подрешётки и в нашем случае действительно определяется симметрией подрешётки SeO_4^{2-} .

§3. Оптические свойства несоответственных структур.

Рассмотрим некоторую локальную характеристику кристалла, описываемую параметром w . В общем случае w может быть скаляром, вектором или тензором произвольного ранга. В параэлектрической фазе ввиду трансляционной симметрии кристалла величина w не зависит от координаты и её изменение не вызывает принципиальных трудностей. Изменение при переходе из исходной структуры в модулированную вызывается смещениями атомов от их равновесных положений в параэлектрической фазе. В общем случае структура при этом становится трансляционно неинвариантной и $w = w(\vec{R})$. Для определения макроскопических свойств необходимо производить суммирование по всем \vec{R} . Однако если смещения атомов достаточно малы (много меньше параметров ячейки исходной решетки), то величину w в несоответственной фазе можно разложить в ряд по этим малым смещениям. Ограничиваясь первыми двумя членами разложения, получим:

$$w_M(\vec{R}) = w_H + \sum_{i=1}^n \frac{\partial w_H}{\partial u_i(\vec{R}_0)} u_i(\vec{R}), \quad (3.1)$$

где w_M и w_H - величины w в модулированной и параэлектрической фазах соответственно. Учитывая (2.3), имеем:

$$w_M(\vec{R}) = w_H + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} W(\vec{q}) \exp i\vec{q}\vec{R}, \quad (3.2)$$

где

$$W(\vec{q}) = 2 \sum_{i=1}^n \frac{\partial w_H}{\partial u_i(\vec{R}_0)} f_i(\vec{q}).$$

Величина $W(\vec{q})$, как следует из (3.2), должна быть инвариантна относительно всех операций симметрии модулированной фазы.

В частности, т.к. во всех известных модулированных фазах сегнетоэлектриков направления \vec{q} и $-\vec{q}$ неразличимы, то

$W(\vec{q}) = W(-\vec{q})$, и тогда из (3.3) получим:

$$W_m(\vec{n}) = W_n + \sum_{\{\vec{q}\}} W(\vec{q}) \cos \vec{q}\vec{n}. \quad (3.4)$$

Если все вектора \vec{q} соразмерны векторам обратной решетки парафазы, то

$$\cos \vec{q}\vec{n} = 1,$$

и

$$W_m(\vec{n}) = W_n + \sum_{\{\vec{q}\}} W(\vec{q}) \equiv W_n, \quad (3.5)$$

что, как уже упоминалось выше, соответствует переходу в фазу увеличением элементарной ячейки структуры (несобственные сегнетоэлектрики). При других \vec{q} образуется несоизмерная фаза.

Выражения, подобные (3.4), могут быть написаны для любых, в том числе и оптических характеристик модулированных структур. Компоненты тензора диэлектрической восприимчивости, описывающего линейные оптические свойства модулированной структуры, согласно (3.2), зависят от \vec{n} . Рассмотренные в §2 симметричные соотношения справедливы и в этом случае. Ряд эффектов, возникающих при распространении света в подобных структурах, описан на примере холестерических и хиральных смектических жидких кристаллов в работах [11, 12]. Взаимодействие света с геликоидальными магнитными структурами рассмотрено в [13, 14]. В настоящей работе будет проведен подробный анализ величин, определяющих комбинационное рассеяние света первого порядка (тензор КР), и генерацию второй оптической гармоники (тензор нелинейной диэлектрической восприимчивости второго порядка).

За. Комбинационное рассеяние первого порядка в несоизмерных структурах.

Комбинационное рассеяние света в кристаллах происходит на флуктуациях электронной восприимчивости, индуцированных колебаниями решетки. Из-за трансляционной симметрии идеального кристалла и малости волнового вектора падающего света, который можно приближенно считать равным нулю, следует, что сумма волновых векторов фононов, участвующих в комбинационном рассеянии, должна быть равна нулю. Мы ограничимся рассмотрением комбинационного рассеяния первого порядка. В идеальной кристаллической решетке закон сохранения энергии и импульса приводит к тому, что энергия испущенного фотона отличается от энергии падающего на энергию фонона с нулевым волновым вектором ($\vec{n} = 0$), равную $\pm \hbar \omega_j(0)$ где j - номер ветви. Отличным от нуля частотам при

$\vec{n} = 0$ соответствуют оптические фононы - и поэтому только эти колебания могут участвовать в КР первого порядка. Спектр КР первого порядка в гармоническом приближении состоит из конечного числа (δ - образных) пиков на частотах $\omega_0 - \omega_j(0)$ (стоксовы линии) и $\omega_0 + \omega_j(0)$ (антистоксовы линии), где

ω_0 - частота падающего света. Обсудим процесс КР на кристаллах с одномерной модуляцией структуры. Если частота падающего света много меньше частот электронных переходов в кристалле, то интенсивность КР в единичный телесный угол в единицу времени равна [15, 16]:

$$I(\omega) = \frac{\omega_0^4}{2\pi c^3} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} h_\alpha h_\beta L_{\alpha\beta\gamma\lambda}(\Omega) E_\gamma^- E_\lambda^+, \quad (3.6)$$

где $\omega = \omega_0 + \Omega$ - частота рассеянного света, \vec{n} - единичный

вектор, направленный по вектору электрического поля одной из линейно-поляризованных компонент рассеянного света и перпендикулярный направлению рассеяния, \vec{E}^+ и $\vec{E}^- = (\vec{E}^+)^*$ - амплитуды при экспонентах с отрицательной и положительной частотой, описывающих падающее излучение, величина $L_{\alpha\beta\gamma\lambda}(\Omega)$ определяется соотношением:

$$L_{\alpha\beta\gamma\lambda}(\Omega) = \frac{1}{2N} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_{\beta\lambda}^H(t) \chi_{\alpha\gamma}^{H*}(0) \rangle \exp i\Omega t \quad (3.7)$$

здесь $\chi_{\alpha\beta}^H$ - тензор электронной восприимчивости, зависящий от смещений ядер. Усреднение проводится с помощью классической функции распределения Гиббса. Компоненты тензора восприимчивости можно разложить в ряд по степеням смещений, обусловленных тепловыми колебаниями атомов около их равновесных положений:

$$\chi_{\alpha\beta}^H(\{\vec{E}\}) = \chi_{\alpha\beta}^{H(0)} + \sum_{\vec{n}} \chi_{\alpha\beta\gamma}^H(\vec{n}) \epsilon_{\gamma}(\vec{n}) \dots \quad (3.8)$$

Мы применяем феноменологический подход и будем считать $\{\chi_{\alpha\beta\gamma}^H(\vec{n})\}$ неизвестными параметрами, величина которых должна быть определена из экспериментальных данных.

При подстановке (3.8) в (3.7) член нулевого порядка дает релеевское рассеяние, при котором частоты рассеянного и падающего света совпадают. Линейный по смещениям член соответствует КР первого порядка, при котором свет рассеивается, поглощая или рождая колебания решетки. Нас интересует именно этот процесс.

Как и для случая однородно деформированных систем [15], аналогично (3.1), разложим $\chi_{\alpha\beta\gamma}^H(\vec{n})$ в ряд по $Q(\vec{n})$:

$$\chi_{\alpha\beta\gamma}^H(\vec{\alpha}) = \chi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)}(\vec{\alpha}) + \sum_{\vec{n}} \chi_{\alpha\beta\gamma\chi}^{\prime}(\vec{n}, \vec{\alpha}) u_{\chi}(\vec{n}) + \sum_{\vec{n}, \vec{\alpha}'} \chi_{\alpha\beta\gamma\chi\chi}^{\prime\prime}(\vec{n}, \vec{n}', \vec{n}'') u_{\chi}(\vec{n}') u_{\chi}(\vec{n}'') + \dots \quad (3.9)$$

При дальнейшем разложении мы ограничимся квадратичными по Q членами в (3.9). Выразим изменение тензора электронной поляризуемости

$$\delta \chi_{\alpha\beta}^H = \chi_{\alpha\beta}^H(\{\vec{E}\}) - \chi_{\alpha\beta}^{H(0)}$$

в виде разложения по степеням комплексных нормальных координат системы, невозмущенной неоднородной деформацией. С этой целью выразим ядерные смещения через комплексные нормальные координаты $Q(\vec{j})$ [15]:

$$\epsilon_{\alpha}(\vec{n}) = \frac{1}{\sqrt{Nm_{\alpha}}} \sum_{\vec{j}} Q(\vec{j}) \epsilon_{\alpha}(\vec{j}, \vec{n}) \exp 2\pi i \vec{k} \vec{n}, \quad (3.10)$$

где m_{α} - масса атома, N - число атомов системы, $\epsilon_{\alpha}(\vec{j}, \vec{n})$ - ортонормированные собственные вектора динамической задачи невозмущенной системы. Тогда на основании (3.8) с учетом (3.9) получаем выражение для флуктуации тензора электронной поляризуемости в виде ряда по степеням $Q(\vec{j})$:

$$\delta \chi_{\alpha\beta}^H = \sqrt{N} \sum_{\vec{j}} \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{j}) Q(\vec{j}) + \sum_{\vec{j}, \vec{k}} [\chi_{\alpha\beta}^{\prime}(\vec{j}, \vec{k}) Q(\vec{j}) + \chi_{\alpha\beta}^{\prime\prime}(\vec{j}, \vec{k}) Q(\vec{k})]. \quad (3.11)$$

При выводе (3.11) использовались свойства коэффициентов в (3.9), вытекающие из трансляционной инвариантности исходной структуры [15], и соотношения

$$\int \exp 2\pi i \vec{R} \vec{n} = N \Delta(\vec{R}),$$

где величина $\Delta(\vec{R})$ равна единице в тех случаях, когда вектор \vec{R} равен нулю или вектору обратной решетки, и равна нулю во всех остальных случаях. Коэффициенты разложения имеют вид:

$$\chi_{\alpha\beta}(\vec{j}) = \sum_{\alpha\gamma} \chi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)}(\vec{0}) e_{\gamma}(\alpha|\vec{j}) m_{\alpha}^{-1/2}, \quad (3.12)$$

$$\chi'_{\alpha\beta}(\vec{j}) = \sum_{\alpha\gamma} \chi'_{\alpha\beta\gamma}(\frac{\vec{n}\vec{n}'}{\alpha\alpha'}) e_{\gamma}(\alpha|\vec{j}) \frac{1}{\sqrt{N}} \times \\ \times U_{\alpha}(\vec{n}') m_{\alpha}^{-1/2} \exp 2\pi i \vec{R} \vec{n}, \quad (3.13)$$

$$\chi''_{\alpha\beta}(\vec{j}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha\gamma} \chi''_{\alpha\beta\gamma}(\frac{\vec{n}\vec{n}'\vec{n}''}{\alpha\alpha'\alpha''}) e_{\gamma}(\alpha|\vec{j}) \times \\ \times U_{\alpha}(\vec{n}') U_{\alpha}(\vec{n}'') m_{\alpha}^{-1/2} \exp 2\pi i \vec{R} \vec{n}. \quad (3.14)$$

Первый член в разложении (3.11) описывает КР первого порядка, спектр которого состоит из линий со стоксовыми и антистоксовыми частотами $\omega_0 \neq \omega_j(0)$. Учет оставшихся членов (3.11), связанных с параметрами неоднородной деформации, приводит к тому, что спектр рассеяния первого порядка становится непрерывным.

С целью более наглядного описания процесса рассеяния, рассмотрим следующую модель кристалла. Выберем кристалл орторомбической системы, оси которого Ox , Oy , Oz направлены вдоль векторов элементарных трансляций \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , то есть

параллельны осям симметрии второго порядка. В элементарной ячейке имеется два атома, их положение определяется векторами $\vec{r}(\alpha=0) = 0$ и $\vec{r}(\alpha=1) = \vec{a}/2$. Параметры деформации зададим в виде:

$$U_{\alpha}(\vec{r}') = A_{\alpha} \sin \pi (2\vec{n}\vec{R}_0 + \vec{r}')(1-\delta), \quad (3.15)$$

где A_{α} - амплитуда модуляции, $\vec{R}_0 = \vec{l}/a$, \vec{l} - единичный вектор, направленный вдоль оси a . При $\delta=0$ (3.15) обращается в нуль. Для заданной модели в дальнейшем будем определять интенсивность стоксовской и антистоксовской компонент рассеянного света, поляризованного параллельно оси β , когда падающий свет поляризован параллельно оси α :

$$I_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \delta \chi''_{\alpha\beta}(t) \delta \chi''_{\alpha\beta}(0) \rangle \exp(-i\Omega t). \quad (3.16)$$

При этом (3.6) сводится к виду:

$$I(\omega) = \frac{\omega_0^4 I_0}{2\pi \sigma^2} \sum_{\alpha\beta} I_{\alpha\beta}(\Omega), \quad (3.17)$$

где I_0 - интенсивность падающего излучения. Выполним в (3.16) усреднение, получим:

$$I_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{\hbar T \sqrt{N}}{2} \sum_j [|\sqrt{N} \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(j)|^2 + \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(j) \chi_{\alpha\beta}^{*(0)}(j) + \\ + \chi_{\alpha\beta}^{*(0)}(j) \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(j) + \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(j) \chi_{\alpha\beta}^{*(0)}(j) + \chi_{\alpha\beta}^{*(0)}(j) \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(j)] \times \\ \times \frac{1}{\omega_j^2(0)} [\delta(\Omega - \omega_j(0)) + \delta(\Omega + \omega_j(0))] + \\ + \frac{\hbar T}{2} \sum_j | \chi'_{\alpha\beta}(j) |^2 \frac{1}{\omega_j^2(\vec{R})} [\delta(\Omega - \omega_j(\vec{R})) + \delta(\Omega + \omega_j(\vec{R}))], \quad (3.18)$$

где T — температура, k — постоянная Больцмана. При усреднении в (3.16) комплексные нормальные координаты $Q(j)$ выражались через вещественные координаты $q(j)$, гамильтониан в которых имеет вид [15]:

$$H = \frac{1}{2} \sum_j \{ q^2(j) + \omega_j^2 q^2(j) \}.$$

Для выбранной нами модели, в которой каждый атом является центром инверсии, коэффициенты $\chi_{\alpha\beta\gamma}^{(0)}(\vec{R})$ равны нулю [17] и, следовательно, (3.16) сводится к виду:

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{kT}{2} \sum_j |\chi'_{\alpha\beta}(j)| \frac{1}{\omega_j^2(\vec{R})} [\delta(\omega - \omega_j(\vec{R})) + \delta(\omega + \omega_j(\vec{R}))]. \quad (3.19)$$

Тензор электронной восприимчивости в \vec{R} -пространстве

$\chi'_{\alpha\beta}(j)$ приближенно запишем в виде:

$$\chi'_{\alpha\beta}(j) = N \sum_{\vec{R}} [m_0^{-1/2} \chi'_{\alpha\beta\gamma}(\vec{R}) e_{\gamma}(0|\vec{R}) u_x(\vec{R}) + m_1^{-1/2} \chi'_{\alpha\beta\gamma}(\vec{R}) e_{\gamma}(1|\vec{R}) u_x(1)] \exp 2\pi i \vec{R} \vec{n}', \quad (3.20)$$

или с учетом (3.15):

$$\chi'_{\alpha\beta}(j) = N \frac{A_x}{2i} \sum_{\vec{R}} \frac{1}{m_x} \chi_{\alpha\beta\gamma}(\vec{R}) e_{\gamma}(\vec{R}|\vec{R}) \times [\Delta(\vec{R}-\vec{R}_S) \exp \pi i \vec{R} (1-\delta) - \Delta(\vec{R}+\vec{R}_S) \exp \pi i \vec{R} (\delta-1)]. \quad (3.21)$$

Рассмотрим далее только две экспериментальные ситуации.

(а) Волновой вектор падающей световой волны, поляризованной вдоль Oz , параллелен оси Ox , вдоль которой структура решетки синусоидально модулирована. В рассеянном свете в направлении Oy наблюдаем свет, поляризованный вдоль Ox , за что ответственны компоненты тензора четвертого ранга:

$$\chi'_{zxyx}(\vec{R}) \quad \chi'_{zyyx}(\vec{R}). \quad (3.22)$$

(б) Волновой вектор падающей световой волны, поляризованной вдоль Oz , параллелен оси Oy (т.е. перпендикулярен оси несоизмерности). В рассеянном свете в направлении Ox наблюдаем свет, поляризованный вдоль Oy , за что ответственны компоненты:

$$\chi'_{zyyx}(\vec{R}) \quad \chi'_{zyyx}(\vec{R}). \quad (3.23)$$

Используя правила преобразования тензора четвертого ранга при операциях симметрии кристалла [17], легко установить, что

$$\chi'_{zyyx}(\vec{R}) = \chi'_{zyyx}(\vec{R}) = 0 \quad (3.24)$$

отличны от нуля только коэффициенты:

$$\chi'_{zxyx}(\vec{R}) = \alpha_0, \quad \chi'_{zyyx}(\vec{R}) = \alpha_1, \quad (3.25)$$

ответственные за рассеяние света вдоль Oy , если падающий свет распространяется вдоль оси несоизмерности. Тогда с учетом (3.21) вклад в интенсивность КР (3.17), обусловленный модуляцией структуры, описывается выражением:

$$I(\omega) = \frac{NkTA^2 I_0 \omega_0^4}{8\pi c^3} \sum_{\vec{R}} \frac{\alpha_x \alpha_x}{j \alpha_x \sqrt{m_x m_x}} \frac{1}{\omega_j^2(\vec{R}_S)} \times$$

$$\times [e_z(\vec{R}|\vec{R}_S) e_z^*(\vec{R}|\vec{R}_S) \exp \pi i (\vec{R}-\vec{R}_S) (1-\delta) + e_z(\vec{R}|\vec{R}_S) e_z^*(\vec{R}|\vec{R}_S) \times \exp \pi i (\vec{R}-\vec{R}_S) (\delta-1)] [\delta(\omega - \omega_0 - \omega_j(\vec{R}_S)) + \delta(\omega - \omega_0 + \omega_j(\vec{R}_S))]. \quad (3.26)$$

В случае (б) этот вклад равен нулю.

Таким образом, учёт влияния периодической модуляции структуры на величины $\chi_{\alpha\beta\gamma}(\vec{R})$ приводит к тому, что в несоизмерной фазе можно наблюдать рассеяние на неупорядоченных фоновых (рис.1). Этот эффект подобен двухфононному КР. Меняя

δ (для этого достаточно изменять температуру несоизмерной фазы), можно изменить фононы, участвующие в рассеянии света. Интенсивность рассеянного света (3.26) зависит от величины δ . Если также учесть влияние модуляции на собственные вектора нормальных колебаний структуры, то, как и для изотопически неупорядоченных кристаллов [17], при рассеянии дополнительно будет наблюдаться сплошной спектр.

Экспериментально в спектрах ИР несоизмерных фаз ряда сегнетоэлектриков наблюдались аномалии температурного хода ширины линий, а также сдвиги и расщепления их частот [18,19]. Данные эффекты могут быть связаны с изменением правил отбора в этой фазе.

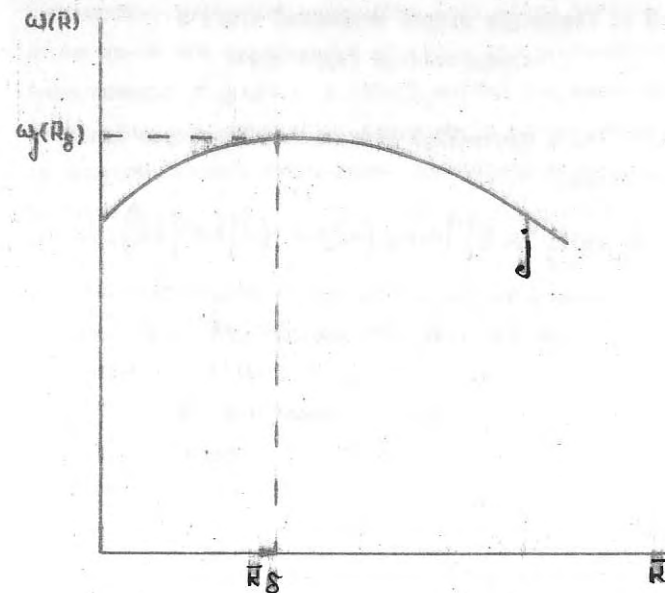


Рис.1. Дисперсионная зависимость j -ой ветви колебаний решетки кристалла. Показана частота, проявляющаяся в спектре ИР в несоизмерной фазе.

3 б. Генерация второй гармоники (ГВГ) в модулированных структурах.

Согласно [20], ГВГ в кристаллах определяется вектором нелинейной поляризации среды:

$$P_i^{(2)}(\vec{n}, t) = 4d_{ijkl}(\vec{n}) E_j^{(1)}(\vec{n}) E_l^{(1)}(\vec{n}) \exp[-i[2\omega t - (\vec{R}(j) + \vec{R}(l))\vec{n}]], \quad (3.27)$$

где $d_{ijkl}(\vec{n})$ — компонента тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости второго порядка для \vec{n} -той ячейки, $E_j^{(1)}(\vec{n})$ — амплитуда поля первой гармоники, ω — частота и $\vec{R}(j)$ — волновой вектор поля первой гармоники с поляризацией вдоль оси j . Так как эффективность преобразования первой гармоники во вторую вдали от синхронизма невелика, то мы пренебрежем изменением $E_j^{(1)}(\vec{n})$ с координатой и будем далее считать:

$$E_j^{(1)}(\vec{n}) = E_j^{(1)}(0) = E_j^{(1)}.$$

Производя разложение $P_i^{(2)}(\vec{n}, t)$ аналогично (3.4) с учётом (2.15) для кристаллов, подложных $K_2 SeD_4$, получим:

$$P_{mi}^{(2)}(\vec{n}, t) = P_{mi}^{(2)} + \tau_i^{(2)} \cos 2\pi \frac{1-\delta}{\ell} \vec{a}^* \vec{n}, \quad (3.28)$$

где

$$\tau_i^{(2)} = D_{ijl} E_j^{(1)} E_l^{(1)} \exp[-i[2\omega t - (\vec{R}(j) + \vec{R}(l))\vec{n}]], \quad (3.29)$$

$$D_{ijl} = \sum_{s_1 s_2} \left\{ d_{ijl} [k_s(j) + k_s(l)] + \frac{\partial d_{ijl}}{\partial u_s(\frac{\vec{n}}{\ell})} \right\} f_s(\frac{\vec{n}}{\ell}). \quad (3.30)$$

Первая часть выражения (3.30) описывает вклад в нелинейную поля-

ризуемость, вызванный изменением фазы волны накачки на данном атоме из-за его смещения, а вторая — вклад, вызванный изменением тензора $d_{ijl}(\vec{n})$ в данной ячейке под влиянием этих смещений. Так как длина волны света много больше величины смещений, то вкладом первого члена можно пренебречь и рассматривать в дальнейшем:

$$D_{ijl}(\vec{q}) = \sum_{s_1 s_2} \frac{\partial d_{ijl}}{\partial u_s(\frac{\vec{n}}{\ell})} f_s(\frac{\vec{q}}{\ell}). \quad (3.31)$$

Подставляя (3.28) и (3.29) в (3.27), получим:

$$P_{mi}^{(2)}(\vec{n}, t) = 4d_{mijl}(\vec{n}) E_j^{(1)} E_l^{(1)} \exp[-i[2\omega t - (\vec{R}(j) + \vec{R}(l))\vec{n}]], \quad (3.32)$$

где

$$d_{mijl}(\vec{n}) = D_{ijl}(\vec{q}) \cos 2\pi \frac{1-\delta}{\ell} \vec{a}^* \vec{n}, \quad (3.33)$$

так как $d_{mijl}(\vec{n}) = 0$ для кристаллов с пространственной группой $Pn3m$ [20]. Вводя $\vec{a}_\ell^* = \vec{a}^*/\ell$ — вектор обратной решетки сегнетофазы — получим:

$$d_{mijl}(\vec{n}) = D_{ijl}(\vec{q}) \cos 2\pi \delta \vec{a}_\ell^* \vec{n}, \quad (3.34)$$

где \vec{n} теперь нумерует ячейки сегнетофазы. В общем случае далее было бы необходимо подставить (3.34) в (3.32) и производить решение уравнений Максвелла. Однако, так как периоды изменения поля накачки и величины $d_{mijl}(\vec{n})$ с координатой много больше параметров ячейки ($(\vec{R}(j)\vec{a} \ll 1, \delta \ll 1)$), то, следуя [20, 21], перейдем к рассмотрению кристалла как непрерывной среды с изменяющейся величиной $d_{mijl}(\vec{R})$. Кроме того, так как единст-

венной переменной величиной, определяющей \bar{q} , является параметр модуляции δ , то будем рассматривать $D_{mijl}(\bar{q})$ как функцию этого параметра. Тогда для напряженности поля второй гармоники получим:

$$E_i^{(2)} = -\frac{32\pi i \omega^2}{\kappa(\bar{q}) c^2} E_j^{(1)} E_l^{(1)} \int_V dv d_{mijl}(\bar{R}) \exp i \Delta \bar{R} \bar{R}, \quad (3.35)$$

где S - сечение пучка излучения, V - объем, в котором происходит преобразование частоты,

$$\Delta \bar{R} = \bar{R} \left(\frac{1}{j} \right) + \bar{R} \left(\frac{1}{l} \right) - \kappa \left(\frac{2}{i} \right).$$

Производя в (3.35) интегрирование, получим, что поле второй гармоники пропорционально δ , если $\bar{a} \parallel \Delta \bar{R}$ и пропорционально величине

$$\frac{2\sqrt{\pi} S}{a_l^2 \delta \sin \theta} J_1 \left(\delta \sqrt{\frac{S}{\pi a_l^2}} \sin \theta \right),$$

если \bar{a} и $\Delta \bar{R}$ образуют угол θ . Здесь J_1 - функция Бесселя первого порядка. Так как в известных кристаллах $\delta \ll 0,1$, а величина δ имеет макроскопические размеры (порядка 1 мм^2) то, как показывают оценки, при $\theta \neq 0$ интенсивность ГВГ будет слишком слабой, чтобы её зарегистрировать экспериментально. Поэтому в дальнейшем рассматривается только случай $\theta = 0$. Отметим, что проведенные оценки верны только при $\delta \neq 0$.

В этом случае для интенсивности ГВГ в несоразмерной фазе получим:

$$I(2\omega) = \frac{c}{2\pi S} \left| \frac{16\pi \omega^2 L}{\kappa(\bar{q}) c^2} D_{mijl}(\delta) E_j^{(1)} E_l^{(1)} \right|^2 \left\{ \left[\alpha \left(\Delta \kappa - \frac{\delta}{a_l} \right) L \right]^2 + \left[\alpha \left(\Delta \kappa + \frac{\delta}{a_l} \right) L \right]^2 - 2 \cos \delta \frac{L}{a_l} \alpha \left(\Delta \kappa - \frac{\delta}{a_l} \right) L \alpha \left(\Delta \kappa + \frac{\delta}{a_l} \right) L \right\}, \quad (3.36)$$

где L - длина кристалла,

$$\alpha \left(\left(\Delta \kappa \pm \frac{\delta}{a_l} \right) L \right) = 2 \frac{\sin \frac{1}{2} \left(\Delta \kappa \pm \frac{\delta}{a_l} \right) L}{L \left(\Delta \kappa \pm \frac{\delta}{a_l} \right)}$$

Величины $D_{mijl}(\delta) \cos 2i\delta \bar{a}_i^* \bar{R}$ - компоненты тензоры нелинейной восприимчивости того элементарного объема кристалла, который является его элементарной ячейкой в сегнетофазе. В несоразмерной фазе он должен быть инвариантен относительно преобразований симметрии её трехмерной точечной группы, т.е., согласно (2.24a), совпадает по виду с тензором d_{ijl} триклинного кристалла, и все компоненты $D_{mijl}(\delta \neq 0)$ могут быть ненулевыми. ГВГ может наблюдаться в том случае, если $\theta = 0$, независимо от поляризации излучения первой и второй гармоник. При переходе из несоразмерной фазы в сегнетовэлектрическую ($\delta = 0$) симметрия повышается до $Pna2_1$, тензор D_{mijl} приобретает вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{113} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{223} & 0 & 0 \\ d_{311} & d_{322} & d_{333} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

и не зависит от \bar{R} , как и следовало ожидать. Интересно отметить, что, как следует из (3.36), при $\delta \neq 0$ (в несоразмерной фазе) изменяются условия синхронизма для ГВГ. Интенсивность ГВГ имеет резкие максимумы при

$$\Delta \kappa = \pm \frac{\delta}{a_l}. \quad (3.38)$$

и при достаточно малых δ (вблизи перехода в сегнетофазу) можно ожидать заметного увеличения интенсивности ГВГ.

Экспериментальная проверка полученных результатов была проведена на кристалле $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ ($T_c = 175 \text{ K}$, $T_l = 185 \text{ K}$). Измерения проводились на установке, подробно описанной в [22]. На рис.2 приведена температурная зависимость интенсивности ГВГ в компонентах d_{333} (разрешена в сегнетофазе) и d_{233} (запрещена в сегнетофазе). В обоих компонентах наблюдается достаточно интенсивная генерация, причём в d_{233} имеется заметный максимум около T_c , что, возможно, связано с приближением к условию синхронизма.

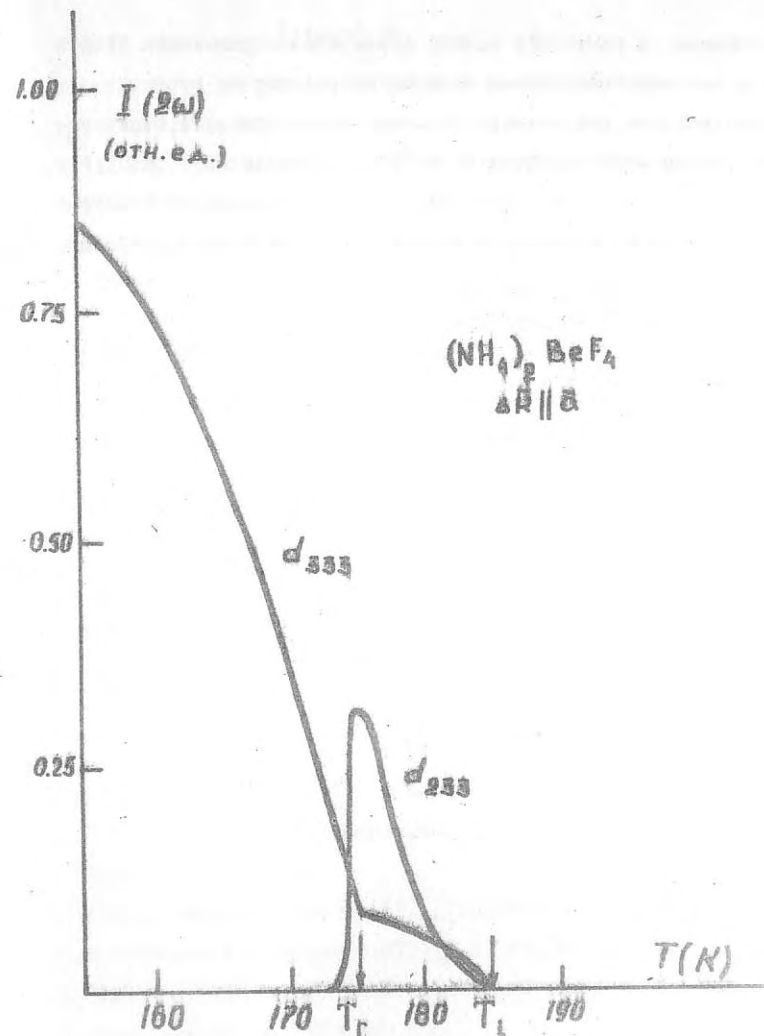


Рис.2.

Температурная зависимость интенсивности ГВГ в кристалле $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ ($\Delta R \parallel a$).

Таким образом, в настоящей работе рассмотрено применение теории симметрии к изучению оптических свойств несовершенных структур сегнетоэлектрических кристаллов. Показана плодотворность этого метода для изучения вида тензоров КР и ГВГ в несовершенных фазах этих кристаллов. При малых отклонениях атомов от исходных положений, когда становится применимой теория возмущений, виды тензоров, полученные согласно этой теории и из симметрии структуры, совпадают. Эти выводы частично подтверждены экспериментально.

Литература.

1. J. Nada, M. Mori, Y. Yamada. Solid State Communications, 23, 4, 1977, 247-249.
2. M. Iizumi, J. D. Axe, G. Shirane, K. Shimaoka. Phys. Rev., BI5, 9, 1977, I392-I410.
3. Y. Makita, Y. Yamauchi. J. Phys. Soc. Japan, 37, 5, 1974, I470.
4. M. Iizumi, K. Gesi. Solid State Communications, 22, I, 1977, 37-44.
5. J. Shiroishi, A. Nakata, S. Sawada. J. Phys. Soc. Japan, 40, 3, 1976, 911-913.
6. H. Jakobi. Z. Krist., I32, 4-6, 1970, 434-435.
7. C. J. de Pater, C. van Dijk. Phys. Rev., BI6, 3, 1978, I281-I292.
8. А. П. Леванюк, Д. Г. Санников. УФН, II2, 4, 1974, 561-589.
9. A. Janner, T. Janssen. Phys. Rev., BI5, 2, 1977, 643-658.
10. Н. В. Белов, Т. С. Кунцевич. Acta Cryst. A27, 6, 1971, 511-517.
11. Е. И. Кац. ЖЭТФ, 59, 5, 1970, 1854-1863.
12. В. А. Беляков, В. Е. Дмитриенко, В. П. Орлов. УФН, I27, 2, 1979, 221-261.
13. М. Ш. Ерухимов, В. В. Тюрнев. ФТТ, I7, 7, 1975, 2440-2444.
14. В. В. Тюрнев, М. Ш. Ерухимов. ФТТ, I8, 6, 1976, 1635-1639.
15. "Динамическая теория кристаллических решеток." М. Горн, Хуан Кунь. ИЛ., М., 1958, 327 стр.
16. T. Luty, A. Mierzelewski, R. W. Minn. Chem. Phys., 29, 4, 1978, 350-365.
17. "Дефекты и колебательный спектр кристаллов." А. Марадулин. "Мир", М., 1968, 278 стр.

18. "Динамические и оптические свойства несоизмерных структур сегнетоэлектрических кристаллов." С.Я.Ветров, А.Н.Вьюрин, В.Ф.Шабанов. Препринт ИФСО-85Ф, Красноярск, 1978, 30 стр.
19. M. Wada, A. Sawada, Y. Ishibashi, Y. Takagi, J. Phys. Soc. Japan, 42, 4, 1977, 1229-1234.
20. "Прикладная нелинейная оптика." Ф.Цернике, Дж.Мидвинтер. "Мир", М., 1976, стр.62.
21. "Статистическая физика." Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, ч. I, "Мир", М., 1976, стр.506.
22. В.П.Ермаков, М.С.Кабанов, В.Ф.Шабанов. ПТЭ, №1, 1979, 190-192.

660036, Красноярск, 36, Академгородок

Объем I, 4 уч.-изд.л. Тираж 200 экз. Заказ 311.

Подписано в печать 16/IV-79. АЛ04791