

Амплитудная зависимость ВТ при 580 К кристалла InSb ориентации [110] (111) после введения в него дислокаций плотностью $\sim 10^3 \text{ см}^{-2}$ представлена на рис. 2. На кривой наблюдаются две критические амплитуды деформации e' и e'' . При снятии амплитудных зависимостей ВТ при более низких температурах абсолютные значения ВТ уменьшаются, а критические амплитуды деформации e' увеличиваются. Вторая же критическая амплитуда e'' наблюдается при температурах выше 400 К. По тангенсу угла наклона прямой в координатах $\ln e' - T^{-1}$ [5] оценивалась энергия взаимодействия между дислокациями и точечными дефектами, оказавшаяся равной ~ 0.07 эВ. Наличие второй критической амплитуды деформации e'' и несовпадение кривых при увеличении и уменьшении амплитуды деформации, по-видимому, свидетельствуют о необратимых изменениях дислокационной структуры InSb при высоких температурах.

Таким образом, проведенные исследования свидетельствуют о значительном влиянии изменения дефектности структуры на неупругие и упругие характеристики монокристаллов антимонида индия.

Список литературы

- [1] Вернер В. Д., Ковязин М. Г., Мильвидский В. Б., Освенский Л. П., Холодный М. Г. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 11. С. 3304—3309.
- [2] Scott W. W., Massone R. C. // Rev. Sci. Instr. 1968. V. 39. N 6. P. 821—823.
- [3] Балап В. З., Засимчук И. К., Козицин В. Н., Фомин А. В. // Приборы и техника exper. 1985. № 6. С. 210—213.
- [4] Никаноров С. П., Кардашев Б. К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М.: Наука, 1985. 253 с.
- [5] Криштал М. А., Головин С. А. Внутреннее трение и структура металлов. М.: Металлургия, 1976. 375 с.

Институт полупроводников АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
6 сентября 1988 г.
В окончательной редакции
12 декабря 1988 г.

РЕЛАКСИРОВАННЫЕ ОСНОВНОЕ И ВОЗБУЖДЕННОЕ СОСТОЯНИЯ F^+ -ЦЕНТРА В MgO

А. В. Безель, В. А. Лобач

Образование кислородной вакансии с последующим захватом электрона (F^+ -центр) в оксидных диэлектриках сопровождается значительными смещениями ионов в окрестности дефекта, которые существенно определяют его энергетические характеристики в основном состоянии [1]. Возбуждение F^+ -центра, представляющее собой перенос локализованного электрона на ближайшее вакантное состояние, нарушает равновесие системы и приводит к возникновению дополнительной релаксации. Эти, рассматриваемые на примере F^+ -центра, процессы носят общий для большинства неметаллов характер.

В расчетах мы использовали модель внедренного кластера, где для вакансии и трех сфер ее ближайшего окружения (27 ионов) проводился детальный расчет электронной структуры, а кристаллический остаток описывался в оболочечной модели, что позволило учитывать не только искажение ближайшего окружения, но и поляризацию всего кристалла [2].

Чтобы воспроизвести потенциалы Маделунга на ионах кластера, моделирующего идеальный кристалл, мы использовали приближение атомной сферы [3]. При этом отказ от приближений нулевой кинетической энергии

и линеаризации позволил сохранить стандартную форму секулярного уравнения метода многократного рассеяния [4]. Радиусы атомных сфер рассчитывались самосогласованно из условия совпадения зарядов в них с зарядами ионов, принятыми в оболочечной модели равными ± 2 . Дополнительным ограничением было требование сохранения суммарного объема всех сфер кластера, равного объему внешней сферы, потенциал за которой полагался равным $+9 R_y$ [5].

Малое различие радиусов ионов в разных координационных сферах кластера (см. таблицу) показывает, что использование внешнего локализирующего потенциала не приводит к значительному возмущению электронной плотности периферических ионов. В расчетах дефектов радиусы сфер не менялись, а остовные состояния «замораживались».

Результаты расчета кластера $OMg_8O_{12}Mg_8$

| Параметр | Сфера | | | |
|---|-------|-------|-------|-------|
| | O | Mg | O | Mg |
| Радиус сферы, Å | 1.54 | 0.82 | 1.58 | 0.87 |
| Заряд в сфере, эл. | 9.93 | 10.01 | 9.98 | 10.01 |
| Потенциал Маделунга, R_y | 1.72 | 1.73 | 1.75 | 1.75 |
| Потенциал кристаллического остатка, R_y | 0.389 | 0.443 | 0.237 | 0.689 |

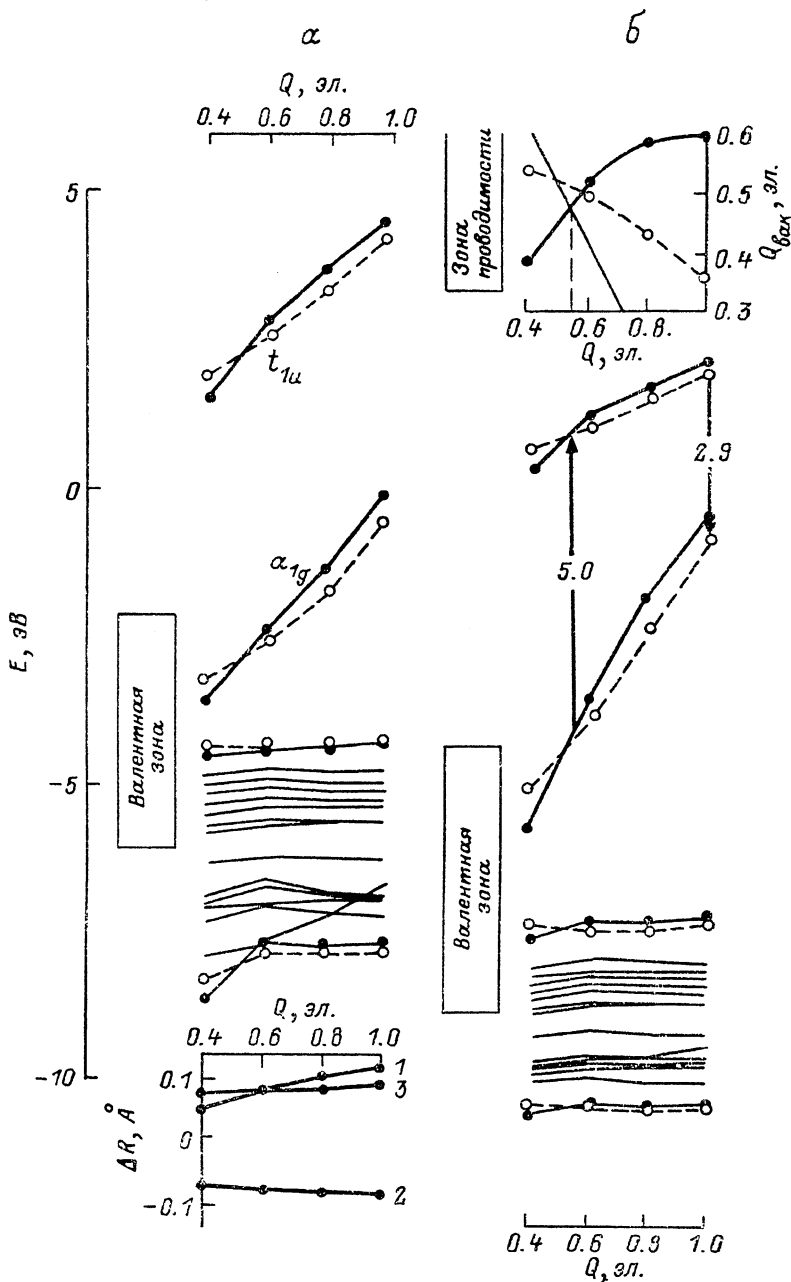
Функционал локальной плотности (ФЛП) занижает энергии элементарных возбуждений в диэлектриках [6], что частично удается преодолеть, корректируя самовзаимодействие (СВК) [7]. В нашей работе СВК осуществлялась в первом порядке теории возмущений. Обменно-корреляционный потенциал вычислялся по интерполяционной формуле [8]. Параметризация оболочечной модели совпадала с использованной в работе [2].

Для оценки влияния поляризации кристалла на одноэлектронный спектр дефекта мы проводили расчеты по следующей схеме: 1) для пробного распределения заряда в оболочечной модели рассчитывались равновесная геометрия кластера и рельеф потенциальной ямы, создаваемой поляризованным кристаллическим остатком; 2) самосогласованно вычислялся одноэлектронный спектр кластера; 3) на полученных волновых функциях в первом порядке теории возмущений рассчитывалась СВК. Результаты расчетов представлены на рисунке. Искажение решетки моделировалось в предположении преимущественной локализации электрона F^+ -центра на ближайших соседях вакансии. Поэтому по оси абсцисс откладывается обобщенная координата искажения, измеряемая в единицах заряда электрона, перенесенного из вакансии на катионы окружения. Соответствующие смещения первых трех сфер изображены внизу на рисунке, а.

ФЛП расчеты (см. рисунок, а) качественно воспроизводят «проседание» состояний окружения дефекта, определяемое его эффективным зарядом. Абсолютное положение уровней дефекта существенно зависит от степени искажения решетки, но энергия поглощения во всем диапазоне близка к экспериментальному значению 4.95 эВ [9]. Возбуждение электрона не сопровождается значительными изменениями в одноэлектронном спектре.

Учет СВК (см. рисунок, б) приводит к сильной зависимости спектра дефекта от искажений решетки. В верхней части этого рисунка изображена зависимость вклада электрона F^+ -центра в заряд вакансии. Видно, что он совпадает с пробным распределением при $Q_{\text{вак}} \approx 0.5$ эл., что можно считать грубой оценкой равновесного распределения. Для равновесного положения энергия поглощения с учетом СВК оказывается близкой

к экспериментальной. При увеличении искажения энергия излучения также близка к эксперименту (3.1 эВ [9]). Оценка равновесного положения для возбужденного дефекта дает большую ошибку, что связано с искусственной локализацией возбужденного состояния F^+ -центра в трех координационных сферах окружения вакансии.



Зависимости параметров расчета от пробного зарядового распределения.

Расчет: a — ФЛП, b — с учетом СВК. Сплошные линии — основное состояние дефекта; штриховые — возбужденное, моделируемое переносом с основного a_{1g} на ближайшее вакантное t_{1u} одноэлектронное состояние дефекта.

Таким образом, в рамках нашей модели воспроизводится зависимость одноэлектронного спектра дефекта от искажения решетки. Кроме того, при учете СВК модель правильно воспроизводит значительную часть стоковского сдвига ($\Delta E = E_{\text{погл.}} - E_{\text{изл.}}$), определяемую перераспределением

электронной плотности и смещениями ионов ближайшего окружения, возникающих в результате возбуждения электрона дефекта.

Расчитанные величины смещений ионов качественно согласуются с результатами полуэмпирического расчета [10]. Расхождения могут быть связаны с малым размером кластера, известными недостатками парных потенциалов. Другим направлением уточнения модели может быть принятый в оболочечной модели ионный характер соединения, т. е. учет делокализации электронного заряда кислорода [1, 11].

В заключение авторы благодарят А. Б. Соболева за помощь в разработке квантовохимических программ.

Список литературы

- [1] Соболев А. Б., Лобач В. А., Шульгин Б. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 2610—2615.
- [2] Vail J. M. // *Phyl. Magazin B*. 1985. V. 51. N 2. P. 101—106.
- [3] Skriver H. L. *The LMTO Method*. Berlin, Springer, 1984.
- [4] Herman F., Williams A. R., Johuson K. H. // *J. Chem. Phys.* 1974. V. 52. N 9. P. 3508—3522.
- [5] Brescansin L. M., Ferraira L. G. // *Phys. Rev.* 1979. V. B20. P. 3415—3421.
- [6] Perdew J. P., Levy M. // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 51. N 20. P. 1884—1887.
- [7] Perdew J. P., Norman M. R. // *Phys. Rev.* 1986. V. B26. N 10. P. 5445—5450.
- [8] Vosko S. H., Wilk I., Nusar M. // *Can. J. Phys.* 1980. V. 58. P. 1200—1211.
- [9] Эварестов Р. А., Котомин Е. А., Еромошкин А. Н. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах. Рига: Зинатне, 1987. 287 с.
- [10] Hallifarton L. E., Cowan D. L., Holroyd L. V. // *Phys. Rev.* 1985. V. B12. N 8. P. 3408—3419.
- [11] Лобач В. А., Кулябин Б. Е., Медведева Н. И., Жуков В. П. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 7. С. 2238—2240.

Уральский политехнический институт им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
14 декабря 1988 г.

УДК 538.11

Физика твердого тела, том 31, в. 5, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 5, 1989

ПОЛОСЫ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА ДИМЕРНЫХ КЛАСТЕРАХ СМЕШАННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ В СЛУЧАЕ МАЛОГО ПЕРЕНОСА

А. В. Палий, Б. С. Цукерблат

В работах [1, 2] метод неупругого рассеяния нейтронов (НРН) был впервые применен для прямого спектроскопического измерения обменного взаимодействия в кластерах переходных металлов. В работе [3] было предложено использовать метод НРН для исследования двойного обмена [4] в димерных системах смешанной валентности (СВ). Расчеты спектров НРН в [3] основаны на модели статического кристаллического поля и справедливы в случае предельно малого электронно-колебательного взаимодействия. Можно ожидать, что взаимодействие с колебаниями приведет к появлению широких электронно-колебательных полос в спектрах НРН. Ниже изложены результаты расчета полос НРН димером, состоящим из ионов с незаполненными d -оболочками (d^2-d^1) в предельном случае малого переноса электрона, когда возможно аналитическое решение электронно-колебательной задачи.

1. Рассмотрим димерные кластеры $a(d^2)-b(d^1)$ и $a(d^1)-b(d^2)$, состоящие из разновалентных ионов a и b . Межионное обменное взаимодействие приводит к двум уровням энергии $E(s) = \mathcal{J}S(S+1)$ ($S=1/2$,