

УДК 539.374 : 548.4
 © 1990

ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРИ ПЕРЕСЕЧЕНИИ ДИСЛОКАЦИЙ В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. А. Кусов, М. И. Клингер, В. А. Закревский

Предложен и исследован механизм возникновения электронных возбуждений в ядрах сталкивающихся дислокаций в щелочно-галлоидных кристаллах под нагрузкой. Проведена оценка вероятности w этих возбуждений.

Как обнаружено экспериментально, пластическое деформирование щелочно-галлоидных кристаллов (ЩГК) сопровождается деформационной эмиссией (ДЭ) электронов и люминесценцией (ДЛ) [1-3]. Результаты этих опытов можно рассматривать как свидетельство генерации электронных возбуждений в деформируемых кристаллах (электронных и дырочных центров). Экспериментально выявлена связь ДЭ и ДЛ с пересечением движущихся дислокаций [2, 4]. Основными плоскостями скольжения в ЩГК являются плоскости типа $\{110\}\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$. Эти плоскости могут быть либо взаимно ортогональными, либо пересекаться под углом 60° (наклонные плоскости). Согласно [5], в ЩГК плоскостями одновременного легкого скольжения могут быть только пары взаимно ортогональных плоскостей. Движение же в наклонных плоскостях затруднено из-за взаимодействия дислокаций, и пересечение дислокаций наклонных систем происходит сравнительно редко. В этой связи наблюдавшиеся на эксперименте резкие различия в эмиссионном отклике отдельных образцов (невоспроизводимость результатов от образца к образцу, а также наличие образцов, у которых ДЭ и ДЛ начинались не сразу после начала упрочнения или носили характер отдельных всплесков) свидетельствуют, по-видимому, о том, что электронные возбуждения возникают только при пересечении дислокаций, принадлежащих к взаимно наклонным плоскостям скольжения.

В работе [6] сделана попытка качественно объяснить эти данные. Проводилось сравнение энергии электронного возбуждения E_2 вблизи ступеньки на дислокации, образовавшейся в результате пересечения в ортогональных плоскостях с аналогичной величиной E_1 (в случае наклонного пересечения). Приближенный расчет показал, что E_2 превышает E_1 примерно на 0.7 эВ для LiF. Очевидно, однако, что такой подход весьма условен, так как электронные возбуждения возникают в процессе самого пересечения ядер дислокаций, когда ступеньки на дислокациях еще только образуются.

Таким образом, возникает задача теоретического описания генерации электронных возбуждений при пересечении движущихся дислокаций и определяемых ими интенсивных атомных перестройках. В известной мере эта задача является обратной по отношению к проблеме генерации дефектов в ЩГК при распаде электронных возбуждений, возникающих при облучении светом, быстрыми электронами, γ -лучами и т. п., или инжекции носителей заряда [7]. В отличие от последней рассматриваемая задача представляется недостаточно исследованной. Так, в работе [8]

сделана попытка качественно объяснить возникновение возбуждений при пересечении дислокаций. Аргументация основана на возможности сближения (при пересечении движущихся дислокаций) локальных дислокационных уровней, отщепляющихся от потолка валентной зоны кристалла на величину Δ_v и от дна зоны проводимости на величину Δ_c . Необходимым условием возможности такого механизма является значительная величина отщепления $\Delta_v, \Delta_c \gtrsim 1$ эВ (для одиночной дислокации). Проведенный недавно расчет [9] Δ_v, Δ_c в ШГК дал, однако, значительно меньшие величины $\Delta_v, \Delta_c \lesssim 0.1$ эВ. Очевидно, что при таких величинах Δ_v, Δ_c пересечение локальных дислокационных уровней вообще не происходит, что делает малореалистичным предложенный в [8] механизм электронных возбуждений. В работе [10] рассматривался иной подход к проблеме возникновения электронных возбуждений при сильных локальных деформациях решетки. Некоторые черты этого подхода использованы и в нашей работе. При этом из всего множества ионов решетки и набора конфигурационных координат, описывающих их смещение, выбираются некоторая определенная пара соседних ионов разного знака (катион X^+ и анион Y^-) и конфигурационная координата R , описывающая их относительное смещение из положения равновесия в невозмущенной решетке. Временные локальные атомные перестройки в процессе пересечения (или в области столкновения ядер дислокаций) и соответствующие смещения локальных энергетических уровней катионного и анионного узлов в полях ионов окружения приводят к тому, что при определенном значении $R=R_0$ уровни анионно-катионной пары (X^+, Y^-) и пары нейтральных атомов (или квазимолекулы $\{X, Y\}$) оказываются достаточно близкими и реализуется квазиклассический переход локальной атомной конфигурации из одного зарядового состояния в другое (перенос заряда $X^+ + Y^- \rightarrow X + Y$ при надлежащем электронном туннелировании).

В соответствии с этим подходом наше исследование осуществлялось по следующей схеме. 1) Проведен анализ конкретных типов локальных атомных перестроек, при которых квазимолекулярные термы некоторой выбранной пары ионов почти пересекаются. 2) Выбор соответствующей пары ионов осуществлен перебором ионных пар, в которых конфигурационная координата R значительно изменяется в процессе пересечения дислокаций. 3) Невозмущенные квазимолекулярные термы пересекаются и возмущением, определяемым их связью с окружением, отталкиваются друг от друга. Наконец, оценена безразмерная вероятность w (при однократном столкновении ядер дислокаций) квазиклассического ландауэнеровского перехода [11] в квазимолекуле $\{X^+, Y^-\}$, отвечающего электронному возбуждению системы. Как будет показано, для рассматриваемой системы применимо известное адиабатическое приближение [12], в котором волновая функция системы $\Psi_n(r, R) = \Phi_n(r, R) \varphi_n(R)$, а энергия быстрой электронной подсистемы $U(R)$, как и ее состояние $\Phi_n(r, R)$, параметрически зависят от координаты R медленной «атомной» подсистемы. Переходы между различными состояниями $\Psi_n(r, R)$ при этом обусловлены возмущением — разностью между полным гамильтонианом системы \mathcal{H} и его адиабатическим приближением $\mathcal{H}_{ад}$. Эти переходы осуществляются в окрестности «точки пересечения» R_0 электронных термов $U_1(R_0) = U_2(R_0)$. Возмущение $\hat{L} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_{ад}$, приводящее к таким переходам, достаточно здесь аппроксимировать оператором неадиабатичности, который следующим образом действует на волновую функцию Ψ_n (см. оценки других вкладов ниже):

$$\hat{L}\Psi_n = \hat{L}_{ад}\Psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\varphi_n(R) \frac{\partial^2 \Phi_n(r, R)}{\partial R^2} + 2 \frac{\partial \varphi_n(R)}{\partial R} \frac{\partial \Phi_n(r, R)}{\partial R} \right], \quad (1)$$

где m^* — эффективная приведенная масса.

Следует отметить, что, как свидетельствуют опыты [3, 4], в результате пересечения движущихся дислокаций образуются F -центры, отличные

от только что отмеченного электронного возбуждения ($X^+ + Y^- \rightarrow X + Y$). Механизм образования F -центра может состоять в том, что электрон «квазимолекулы» $\{X, Y\}$ захватывается анионной вакансией, коль скоро ее электронный уровень расположен ниже электронного уровня квазимолекулы. На возможность возникновения таких анионных вакансий вблизи «полуступеньки» на дислокации указывалось еще в [13, 14]. Существенно, что такие полуступеньки возникают только в результате пересечения дислокаций в наклонных плоскостях скольжения [15]. Поэтому указанный механизм возникновения F -центра невозможен при ортогональном пересечении дислокаций.

1. Атомные перестройки при пересечении дислокаций

Известно, что в кристаллах со структурой NaCl системы скольжения дислокаций определяются шестью плоскостями скольжения типа $\{110\}$ с направлением скольжения $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ [15]. Любые две из этих плоскостей могут быть либо взаимно ортогональными, либо пересекаться под углом в 60° . Каждая краевая дислокация образована из двух полуплоскостей, внедренных в атомную структуру.

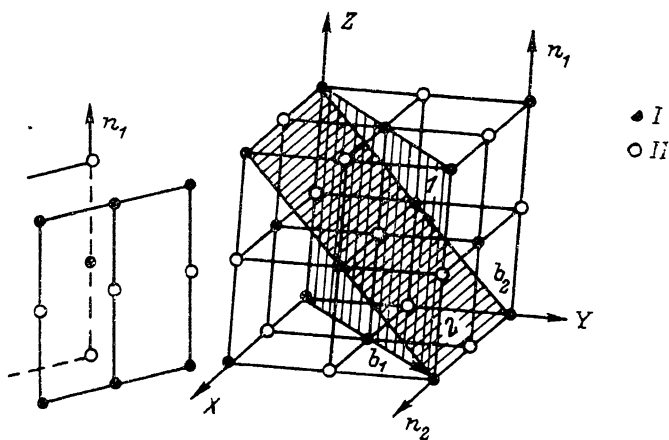


Рис. 1. Геометрия скольжения двух пересекающихся дислокаций в наклонных плоскостях скольжения.

I — катион Na, II — анион Cl. 1 — плоскость скольжения первой дислокации, 2 — плоскость скольжения второй дислокации.

В качестве примера на рис. 1 изображены эти полуплоскости для первой дислокации с вектором Бюргерса $b_1 = a/2 \cdot [110]$ и плоскостью скольжения $(\bar{1}10)$. Линия дислокации определяется вектором $n_1 = [001]$. На рис. 1 изображена также линия второй краевой дислокации с вектором Бюргерса $b_2 = a/2 \cdot [011]$, скользящая в наклонной плоскости скольжения (011) (по отношению к плоскости скольжения первой дислокации). Линия дислокации расположена вдоль направления $n_2 = [100]$. Видно, что пересечение в наклонных плоскостях скольжения происходит при взаимной ортогональности линий дислокаций $n_1 n_2 = 0$. Пересечение в двух взаимно ортогональных плоскостях двух краевых дислокаций невозможно, так как в этом случае линии дислокаций оказываются параллельными. Согласно [15], при взаимно ортогональном пересечении двух плоскостей скольжения возможно пересечение краевой дислокации с винтовой, а также пересечение двух винтовых дислокаций. В наклонных же плоскостях скольжения возможны все типы пересечения дислокаций, включая и взаимное пересечение двух краевых дислокаций (изображенных, например, на рис. 1).

Атомные перестройки в случае пересечения в ортогональных и наклонных плоскостях, как показал геометрический анализ [15], существенно

отличаются друг от друга. Так, в результате пересечения винтовой дислокации с краевой дислокацией во взаимно перпендикулярных плоскостях на каждой из экстраполуплоскостей краевой дислокации образуется по одной ступеньке. Такая конфигурация электрически нейтральна и получила название «полной» ступеньки. Совершенно другая конфигурация λ образуется в результате пересечения двух краевых дислокаций

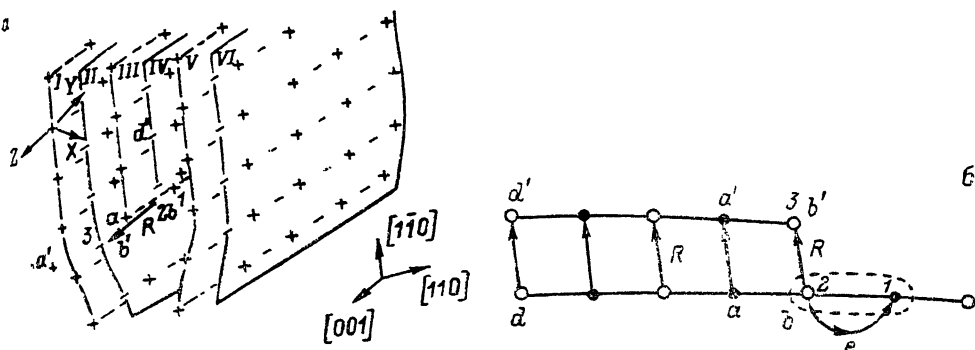


Рис. 2. Атомные перестройки в ядре первой краевой дислокации при пересечении со второй дислокацией.

a — промежуточная атомная перестройка как перемещение подвижной линии в направлении вектора R . Ионы 1, 2 образуют квазимолекулу, внутри которой возможен электронный переход; b — промежуточная атомная перестройка как перегиб на линии ионов, параллельной линии дислокации (увеличенный масштаб рис. 2, а). Обведена квазимолекула и обозначен электронный переход заряда.

в наклонных плоскостях скольжения. В этом случае ступенька образуется только на одной из двух экстраполуплоскостей. Подобная конфигурация (или полуступенька [15]) в отличие от предыдущего случая является уже электрически заряженной. Важно, что отличаются и промежуточные перестройки, в процессе которых происходит изменение электронного спектра и возможны электронные переходы.

Как показал проведенный здесь анализ, эти промежуточные перестройки в первом приближении можно представить как возникновение перегиба на некоторой линии ионов bd , параллельной линии дислокации

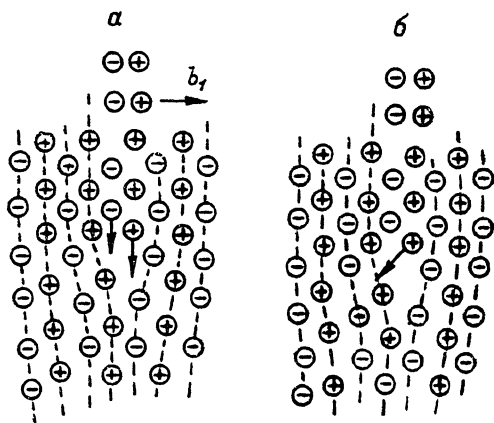


Рис. 3. Проекция направления движения R подвижных линий на первой дислокации на плоскость (001).

Двумя стрелками обозначены проекции R для случая ортогонального пересечения дислокаций, одной стрелкой обозначена проекция R для случая наклонного пересечения дислокаций.

(рис. 2). Это эквивалентно коллективному движению ионов, принадлежащих отрезку bd , в направлении R , совпадающем с вектором Бюргера b_2 второй дислокации, вплоть до своего нового положения $b'd'$. В дальнейшем для краткости мы будем называть подвижное множество ионов отрезка bd термином «подвижная линия».

Направление движения этих подвижных линий (последние расположены перпендикулярно плоскости рис. 3) изображены стрелками на этом рисунке для случая ортогонального (a) и наклонного (b) пересечений. Существенно, что в случае ортогонального пересечения подвижные линии ионов двигаются в направлении, строго параллельном плоскости рис. 3, что приводит к временному сближению разноименных ионов. В случае же

наклонного пересечения промежуточная атомная перестройка существенно отличается от описанной выше. Вместо двух подвижных линий ионов движется только одна подвижная линия в направлении, наклонном по отношению к плоскости рис. 3. На рис. 2, а это направление (для выбранных выше двух краевых дислокаций) изображено стрелкой. Видно, что основная атомная перестройка сводится в этом случае к тому, что подвижная линия ионов, на которой расположен ион 2 (принадлежащий к ядру первой дислокации), двигается в направлении, указанном стрелкой, вытесняя линию ионов, к которой принадлежит ион 3, так что происходит временное сближение одноименных ионов 2 и 3 одновременно с увеличением расстояния между разноименными ионами 1 и 2. Именно эти ионы являются ионами квазимолекулы $\{X^+, Y^-\}$, между которыми возможен перенос электрона от иона галоида к иону металла.

2. Пересечение квазимолекулярных уровней

Исследуем вопрос о возможности пересечения энергетических уровней анионно-катионной пары (1 и 2) $\{X^+, Y^-\}$ с энергией $U_2(R)$ и пары нейтральных атомов или квазимолекулы $\{X, Y\}$ с энергией $U_1(R)$. В рамках модели с одной основной модой R предполагается, что вклад остальных мод в энергию уровней незначителен.

Представим разность энергетических уровней в следующем виде [10]:

$$U_1(R) - U_2(R) = \Delta U(R) + \delta, \quad (2)$$

$$\Delta U(R) = U_1(R) - U_1(0) - U_2(R) + U_2(0), \quad (3)$$

$$\delta = U_1(0) - U_2(0). \quad (4)$$

Здесь δ — разность энергии между основным и первым возбужденным состоянием электронной подсистемы в равновесной конфигурации до пересечения дислокаций. В качестве аппроксимации δ мы будем использовать известную полумпирическую формулу Хильша и Поля [16] (см. также [10])

$$\delta = ae^2/a + E_a - E_I, \quad (5)$$

где a — коэффициент Маделунга, e — заряд электрона, $2a$ — постоянная решетки, E_a — энергия сродства электрона к атому галоида, E_I — энергия ионизации атома щелочного металла.

Полагая, что разность $U_1(R) - U_1(0)$ мала [10], заключаем, что пересечение уровней имеет место при условии

$$U_2(0) - U_2(R) + \delta = 0. \quad (6)$$

Энергию $U_2(R)$ можно представить как электростатическую энергию пары ионов 1 и 2

$$U_2(R) = -\frac{1}{2} [\alpha_1(R) + \alpha_2(R)] \frac{e^2}{a}. \quad (7)$$

Здесь $\alpha_1(R)$, $\alpha_2(R)$ — значения коэффициентов Маделунга для ионов 1 и 2. Учтывая, что $U_2(0) = -ae^2/a$, получим, что пересечение уровней имеет место при условии

$$\frac{1}{2} [\alpha_1(R) + \alpha_2(R)] \frac{e^2}{a} + E_a - E_I = 0. \quad (8)$$

Задача об определении конфигурационной координаты $R = R_0$, соответствующей электронному возбуждению, сводится к расчету α_1 и α_2 и решению уравнения (8) относительно R . Точный расчет α_1 и α_2 представляет собой сложную проблему, так как требует, строго говоря, учета смещений по крайней мере близких ионов, окружающих ионы 1 и 2. Можно, однако, ограничиться приближенной оценкой локальных коэффициентов Маделунга, приняв, что при достаточном сближении ионов одного знака 2

и 3 ($R \geq a/2$) электростатическая энергия иона 2 близка к его энергии при $R=0$ за вычетом энергии оборванной собственной линии ионов $W_2 = (e^2/a) \ln 2$ и энергии, обусловленной сближением с ионом 3, равной $W_1 = e^2/(\sqrt{2}a - R)$,

$$a_2(R) = a - \ln 2 - [a/(\sqrt{2}a - R)]. \quad (9)$$

Аналогично коэффициент Маделунга $\alpha_1(R)$ для иона 1 можно принять равным значению в идеальной решетке α за вычетом энергии взаимодействия с ионами оборванной линии, к которой он сам принадлежит

$$\alpha_1(R) = a - \ln 2. \quad (10)$$

После подстановки (9), (10) в (8) получим следующее условие пересечения энергетических уровней:

$$\alpha \frac{e^2}{a} + E_a - E_I - \frac{e^2}{a} \ln 2 - \frac{e^2}{2(\sqrt{2}a - R)} = 0. \quad (11)$$

Из (11) получим приближенное решение для точки пересечения энергетических уровней

$$\frac{R_0}{a} = \sqrt{2} - e^2/a \left(\delta - \frac{e^2}{a} \ln 2 \right). \quad (12)$$

Подставив в (12) известные значения δ для ЩГК, получим значения локальной деформации решетки $\varepsilon = R_0/a$ при пересечении уровней (см. таблицу). Напомним, что при $R < R_0$ пересечение уровней и, следовательно, электронное возбуждение не может возникнуть. Полученные величины ε сравнительно невелики (можно отметить, что они заметно меньше, чем ε , вычисленные в [10]) и, по-видимому, вполне достижимы в локальных областях при динамическом столкновении ядер дислокаций, сопровождающихся, как отмечалось выше, интенсивными атомными перестройками.

На рис. 4 приведены части кри- вых пересекающихся энергетических уровней U_1 и U_2 , рассчитанные по формулам (2)–(12). Величина расщепления уровней вблизи их точки пересечения Δ , возникающая за счет

неадиабатической части оператора возмущения, может быть оценена. Согласно [17, 18], $\Delta \approx 0.21$ эВ для двухатомной молекулы NaCl и $\Delta \approx \approx 0.17$ эВ для LiF. Релятивистская поправка в расчете Δ невелика и обычно составляет не более 0.01–0.03 эВ [19].

Остановимся на вопросе о возможности пересечения энергетических уровней при ортогональном пересечении дислокаций. В этом случае вместо сближения ионов одного знака (типа 2 и 3) в процессе пересечения происходит сближение ионов разного знака. Соответствующее приближенное выражение для определения точки пересечения энергетических уровней, аналогичное уравнению (12), имеет следующий вид:

$$\frac{R_0}{a} = \sqrt{2} + e^2/a \left(\delta - \frac{e^2}{a} \ln 2 \right). \quad (13)$$

	Кристалл		
	LiF	NaCl	KCl
δ , эВ	11.2	7.96	7.76
ε	0.5	0.3	0.47

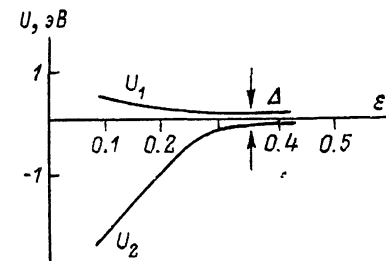


Рис. 4. Энергетические уровни ква- зимолекулы $\{X^+, Y^-\}$ и $\{X, Y\}$ в зависимости от деформации связи $X-Y$. $\varepsilon = R/a$.

U_1 — энергетический уровень $\{X, Y\}$,
 U_2 — энергетический уровень $\{X^+, Y^-\}$.

неадиабатической части оператора возмущения, может быть оценена. Согласно [17, 18], $\Delta \approx 0.21$ эВ для двухатомной молекулы NaCl и $\Delta \approx \approx 0.17$ эВ для LiF. Релятивистская поправка в расчете Δ невелика и обычно составляет не более 0.01–0.03 эВ [19].

Остановимся на вопросе о возможности пересечения энергетических уровней при ортогональном пересечении дислокаций. В этом случае вместо сближения ионов одного знака (типа 2 и 3) в процессе пересечения происходит сближение ионов разного знака. Соответствующее приближенное выражение для определения точки пересечения энергетических уровней, аналогичное уравнению (12), имеет следующий вид:

Для LiF и NaCl это выражение дает чересчур большие величины локальной деформации ($\varepsilon=2.2$ и 2.5), которые вряд ли могут быть достигнуты в процессе пересечения дислокаций.

3. Вероятность электронного перехода

Вычислим теперь вероятность электронного перехода с изменением зарядового состояния локальной атомной конфигурации в момент максимального сближения энергетических уровней. Покажем, что w может быть вычислена в известном адиабатическом приближении. Действительно, критерием применимости адиабатического приближения является малость параметра $\beta = \omega_s / \omega_r \ll 1$, где $\omega_s = V/a$ — эффективная частота взаимного движения дислокаций; ω_r — частота, отвечающая характерной щели в энергетическом спектре. В данном случае роль ширины щели, как видно из предыдущего рассмотрения, играет Δ , и тогда $\omega_r \approx \Delta / \hbar$. Подставив характерные параметры нашей задачи $\Delta \sim 0.1$ эВ, $a \sim 10^{-8}$ см, $V \sim 10^5$ см/с (предельная скорость дислокаций), получим $\beta \leq 0.1$. Даже если бы роль Δ играла $\hbar \omega_D$, где ω_D — характерная дебаевская частота $\omega_D \sim 3 \cdot 10^{13}$, то и тогда бы было $\beta \leq 0.3$. Вероятность w в адиабатическом приближении определяется известной формулой [10, 11]

$$w = \frac{2\pi V}{\hbar} \frac{|V_2(R_0)|^2}{|F_1 - F_2|}, \quad (14)$$

где $F_{1,2} = -\partial U_{1,2}(R_0) / \partial R$ — силы термов, $V_2(R_0)$ — матричный элемент возмущения

$$V_2(R_0) = -\hbar \int \Phi_2^*(r, R_0) \frac{\partial \Phi_1}{\partial R}(r, R_0) dr. \quad (15)$$

Здесь $\Phi_2(r, R)$ — волновая функция начального состояния, соответствующего анионно-катионной паре $\{X^+, Y^-\}$; $\Phi_1(r, R)$ — волновая функция квазимолекулы $\{X, Y\}$.

Для расчета w соответствующие волновые функции выбирались следующим образом: $\Phi_2(r, R)$ — слетеровская волновая функция [20] иона Y^- в состоянии $3p_x$; $\Phi_1(r, R)$ — волновая функция, соответствующая смеси двух состояний: 1) волновой функции электрона, локализованного около Y^- , и 2) волновой функции электрона, локализованного около X^+ ($3s$ -состояние). В рамках теории ЛКАО $\Phi_1(r, R)$ можно записать в виде

$$\Phi_1(r, R) = \Psi(r, R) + \lambda(R) \Phi_2(r, R), \quad (16)$$

где $\Psi(r, R)$ — слетеровская волновая функция, соответствующая локализации электрона около иона X^+ ($3s$ -состояние); $\lambda(R)$ — нормализованный параметр веса $3p_x$ -состояния.

Подставив в (14), (15) характерные параметры: $V \sim 10^5$ см/с, $F_1 \approx 0$, $F_2 \sim 1$ эВ/ $a \sim 3 \cdot 10^4$ эрг/см, после вычисления матричного элемента (15) с учетом (16) получим оценку вероятности электронного возбуждения $w \sim 10^{-2}$ при однократном акте пересечения дислокаций.

Основные результаты настоящего исследования можно резюмировать следующим образом. Проведено сравнительное описание атомных перестроек в ядрах пересекающихся дислокаций в ЦГК со структурой NaCl как в случае пересечения наклонных плоскостей скольжения, так и в случае взаимно ортогонального пересечения. Показано, что перестройки для указанных двух случаев существенно отличаются друг от друга. В случае пересечения в наклонных плоскостях скольжения происходит временное сближение одноименных ионов, тогда как в случае пересечения в ортогональных плоскостях скольжения сближаются разноименные ионы. Из всего множества ближайших пар анион-катион в случае наклонного пересечения удается выделить существенную пару (квазимолекулу), в которой конфигурационная координата R , описывающая растяжение

связи $X^+ - Y^-$, достигает своего критического значения $R = R_0$. При этом возможен электронный переход (перенос заряда $X^+ + Y^- \rightarrow X + Y$).

В рамках теории адиабатического приближения проведена оценка безразмерной вероятности такого электронного возбуждения при однократном столкновении ядер краевых дислокаций, которая оказалась порядка $w \sim 10^{-2}$.

Показано, что в случае пересечения дислокаций в ортогональных плоскостях скольжения в принципе нельзя выделить пару катион—анион, для которой реализуется необходимое для электронного перехода сближение уровней.

В случае пересечения дислокаций в наклонных плоскостях скольжения указан также возможный способ возникновения F -центра из околодефектного электронного возбуждения и вакансии вблизи ступеньки.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Закревский В. А., Пахотин В. А., Вайткевич С. К. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 3. С. 723—729.
- [2] Закревский В. А., Шульдинер А. В. // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 10. № 3. С. 139—143.
- [3] Закревский В. А., Шульдинер А. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3042—3046.
- [4] Шульдинер А. В. // Автореф. канд. дис. ЛФТИ, 1987.
- [5] Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочение кристаллов. Л.: Наука, 1981. 235 с.
- [6] Закревский В. А., Кусов А. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2314—2317.
- [7] Клиггер М. И., Луцкич Ч. Б., Машовец Т. В., Холодарь Г. А., Хейнкман М. К. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 523—558.
- [8] Молоцкий М. И. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 8. С. 2531—2534.
- [9] Кусов А. А., Клиггер М. И., Закревский В. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 7. С. 67—69.
- [10] Belyaev L. M., Martyshev Yu. N., Yushin Yu. Ya. // Acta Physica Scientiarum Hungaricae. 1973. V. 33. N 3. P. 307—322.
- [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 765 с.
- [12] Born M., Kun Huang. Dynamical theory of crystal lattices. Oxford: Clarendon Press, 1954. P. 420.
- [13] Seitz F. // Rev. Mod. Phys. 1951. V. 23. N 23. P. 328—330.
- [14] Seitz F. // Phys. Rev. 1950. V. 80. N 2. P. 239—244.
- [15] Brantley W. A., Bauer Ch. L. // Phys. St. Sol. 1966. V. 18. N 1. P. 465—478.
- [16] Нокс Р. Теория экситонов. М.: Мир, 1966. 219 с.
- [17] Swaminathan P. K., Laaksonen A., Corongiu G., Clementi E. // J. Chem. Phys. 1986. V. 84. N 2. P. 867—871.
- [18] Kahn L. R., Hay J. // J. Chem. Phys. V. 61. N 9. P. 3530—3546.
- [19] Matcha R. L. // J. Chem. Phys. 1976. V. 65. N 5. P. 1962—1965.
- [20] Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир, 1965. 426 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
9 ноября 1989 г.