

говокского максимума (440) кристалла $\text{Hg}_2(\text{Cl}_{0.2}\text{Br}_{0.8})_2$ выше (а) и ниже T_c (б, в). Расщепление брэгговских пиков объясняется возникновением ниже T_c доменов, повернутых на 90° относительно друг друга вокруг оси z . На отражение от плоскости (110) накладывается отражение от плоскости ($\bar{1}\bar{1}0$). Так как в низкотемпературной фазе размеры новой элементарной ячейки по направлениям [110] и [$\bar{1}\bar{1}0$] становятся неравными друг другу, то на дифрактограммах ниже T_c брэгговские рефлексии по направлениям [110] и [$\bar{1}\bar{1}0$] будут расщепляться (рис. 2, б, в). При дальнейшем понижении температуры разность между ними увеличивается. Соответственно изменяются и параметры решетки d_{110} и $d_{\bar{1}\bar{1}0}$ ниже T_c (рис. 1). Момент возникновения ромбического расщепления использовался в качестве репера при определении температуры фазового перехода T_c . В таблице (стб. 5) приведены значения T_c смешанных кристаллов $\text{Hg}_2(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_2$. В области средних концентраций наблюдается ярко выраженный минимум $T_c(x)$. Полученная в настоящей работе зависимость $T_c(x)$ в смешанных кристаллах подтверждает немонотонную зависимость $T_c(x)$, обнаруженную ранее по аномальному рассеянию света для кристаллов $\text{Hg}_2(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_2$ [2].

Характерные особенности изменения дифрактограмм повторяют картину фазового перехода в «чистых» ГОР, что свидетельствует о том, что фазовый переход в кристаллах $\text{Hg}_2(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_2$ происходит из тетрагональной фазы в ромбическую с удвоением элементарной ячейки. Таким образом, низкотемпературные рентгеновские исследования смешанных кристаллов $\text{Hg}_2(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_2$ показали, что в этих кристаллах фазовый переход происходит по той же схеме, что и в чистых ГОР, а именно $D_{1h}^{17} - D_{2h}^{17}$, которая была предложена ранее на основании исследований спектров комбинационного рассеяния [5].

Авторы благодарят А. А. Вайполину и А. А. Каплянскою за обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] Каплянский А. А., Марков Ю. Ф., Барта Ч. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1979. Т. 43. № 8. С. 1641—1650.
- [2] Барта Ч., Добржанский Г. Ф., Лимонов М. Ф., Малкин Б. З., Марков Ю. Ф., Миттельман А. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 10. С. 3153—3158.
- [3] Барта Ч., Задохин Б. С., Марков Ю. Ф., Морозова О. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 5. С. 1515—1518.
- [4] Барта Ч., Жигалов В. П., Задохин Б. С., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2159—2162.
- [5] Dobrzanski G. F., Kaplyanski A. A., Limonov M. F., Markov Yu. F. // Ferroelectrics. 1983. V. 48. N 1. P. 69—80.
- [6] Реньян В. Р. // Технология полупроводникового кремния. М., 1969. С. 335.
- [7] Прохвятилов А. И., Барыльниг А. А. // ПТЭ. 1981. В. 3. С. 261.

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

Поступило в Редакцию
25 июля 1990 г.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОРОГА ОПТИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ И АНИЗОТРОПНОЙ ПОСТОЯННОЙ F -ЦЕНТРОВ NaCl

К. Б. Толыго, Э. Я. Штаерман

Использование динамической теории кристаллической решетки с деформируемыми оболочками [1] позволило последовательно в рамках одинаковых приближений рассмотреть вопрос о поляризации кристалла

NaCl (как инерционной, так и безынерционной) зонным электроном [2], галоидной вакансией [3] и F -центром [4]. Полученные в этих работах энергетические характеристики названных дефектов дают возможность вычислить пороговую энергию оптической ионизации F -центра $E_{\text{ион}}$, отвечающей переходу электрона F -центра из основного состояния в состояние зоны проводимости с минимальной энергией.

Значения анизотропной постоянной $\langle r^{-3} \rangle$ (3) для F -центра

n	$\langle r^{-3} \rangle$, ат. ед. $\cdot 10^{-1}$	
	теор.	эксп. [9]
1	180	220
2	146	202
3	8.3	12
4	11	12.7
5	6.1	7.0
6	4.6	7.6
8	3.1	7.2
9a	2.7	2.7
9b	2.5	2.5
10	2.1	1.9

ума, равна -0.375 эВ [2]. Таким образом, пороговая энергия оптической ионизации составляет

$$E_{\text{ион}} = (4.93 - 0.03 - 1.485 - 0.375) \text{ эВ} = 3.04 \text{ эВ}. \quad (1)$$

Это значение хорошо согласуется с полученным из эксперимента [6] порогом прямой фотоэмиссии с F -центров NaCl $E_{\text{эм}} = 3.8$ эВ при состоянии поверхности, отвечающей работе выхода $\chi \approx 0.6 \div 0.7$ эВ. Действительно, начало прямой оптической ионизации отличается от начала фотоэмиссии на значение работы выхода, т. е. $E_{\text{ион эксп}} \approx 3.2 \div 3.4$ эВ, что практически совпадает с (1). Интересно отметить, что в KCl ионизацию F -центров при температуре ~ 10 К вызывают фотоны $h\nu \geq 2.9$ эВ [7].

Полученная ранее [4] волновая функция F -центра

$$\Psi = b_0 \psi_0(r) + b_g \psi_{04}(r) + \sum_{n=1}^{16} \sum_{l=0}^1 \sum_{L=1}^{L_n} b_{nl} \psi_{s, p, l}(r - r_{sn}^L) \quad (2)$$

(коэффициенты b и узельные функции ψ s -, p - и g -типа даны в [4]) позволяет рассчитать и сравнить с опытом значения анизотропной постоянной

$$\langle r^{-3} \rangle = \int \Psi^2 \frac{(3 \cos^2 \theta_n - 1)}{2r^3} d\tau \quad (3)$$

на различных узлах (θ_n — угол относительно оси z тензора анизотропного сверхтонкого взаимодействия на координатной сфере n [8]) с данными, полученными из сверхтонкой структуры спектров ЭПР. Эту константу для каждой сферы n можно вычислить как сумму двух интегралов: первый — это интеграл в окрестности особой точки $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_n$, а второй для \mathbf{r} , существенно отличных от \mathbf{r}_n . При подстановке (2) в (3) в первом интеграле от $|\Psi|^2$ останется только квадратичная форма функций p -типа с центром в узле \mathbf{r}_n , если пренебречь небольшой примесью g -функций. Коэффициенты этой формы выражаются через веса b и интегралы неортогональности, а интеграл от произведения двух любых p -функций и сомножителя $(3 \cos^2 \theta - 1)/2r^3$ берется аналитически. Второй же интеграл можно оценить через сумму

$$\sum_{ij} b_i b_j a_{ij} \frac{3 \cos^2 \theta_{ij} - 1}{2|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_n|^3}, \quad (4)$$

где a_{ij} — интеграл неортогональности между функциями (если это одна и та же функция, то $a=1$); $|\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_n|$ — расстояние от середины отрезка $\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j$ до узла \mathbf{r}_n ; θ_{ij} — угол между векторами $\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}_n$ и \mathbf{r}_n .

Для первых двух сфер преобладающий вклад дает интеграл от функции, centered на данном узле. Далее анизотропная константа в основном дается выражением (4) (которое при вычислении r^{-3} в [4] вообще не учитывалось), причем для 9-й и 10-й координационных сфер значение асимптотического выражения (4) для $r_n \rightarrow \infty$, т. е. $1/r_n^3$, совпадает с измеренными [9]. В среднем же, как видим из таблицы, отличие лежит в пределах 20 % и не превышает 56 % (для 8-й координационной сферы). Такое согласие весьма приближенной оценки (4) и эксперимента следует признать вполне удовлетворительным. Кроме того, точность вариационного метода относительно варьируемых величин (в данном случае волновой функции и ее интеграла (3)) существенно ниже точности, с которой можно определить энергетические величины — энергии тепловой [4] и оптической (1) ионизации F -центра.

Список литературы

- [1] Толпыго К. Б. // УФЖ. 1959. Т. 4, № 1. С. 72—92.
- [2] Толпыго К. Б., Штаерман Э. Я. // ФТТ. 1978. Т. 2. № 8. С. 2296—2298.
- [3] Евсеев З. Я. // Изв. вузов, физика. 1967. № 4. С. 50—52.
- [4] Толпыго К. Б., Штаерман Э. Я. // ФТТ. 1980. Т. 22, № 8. С. 2383—2387.
- [5] Толпыго К. Б., Томасевич О. Ф. // УФЖ. 1958. Т. 3. № 2. С. 145—164.
- [6] Бичевин В. В. // Тр. ИФ АН ЭССР. 1975. № 43. С. 90—113.
- [7] Wild R. L., Brown F. C. // Phys. Rev. 1961. V. 121. № 5. P. 1296—1302.
- [8] Зевин В. Я. // ФТТ. 1962. Т. 4. № 2. С. 478—484.
- [9] Diegen M. F. e. a. // Phys. St. Sol. 1970. V. 37. P. 237—248.

Донецкий физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
16 апреля 1990 г.