

3.1 эВ (рис. 1, кривая 6), превышающие фон экситонной люминесценции (2.3 и 4.4 эВ) [5] и  $E_x$ -свечения (3.1 эВ) [7]. Эти полосы излучения отличаются от  $\alpha$ -люминесценции КВг (2.6 эВ). Максимумы спектров возбуждения новых полос излучений находятся в области 6.35—6.45 эВ (рис. 1, кривые 7, 8). Следовательно, эти полосы излучения, вероятно, соответствуют излучательному распаду экситонов около деформационно созданных бивакансий.

Для выяснения роли бивакансий в процессе создания дефектов были измерены спектры создания дефектов при 80 К. За меру числа дефектов была принята интенсивность термостимулированной люминесценции при 380—400 К, возникающей при термическом распаде  $Vg^-$ -центров и последующей рекомбинации F-центров. Электронные возбуждения, созданные в области 6.3—6.45 эВ деформированного КВг при дозах радиации  $10^9$ — $10^{10}$  фотон·см<sup>-2</sup>, распадаются на радиационные дефекты (рис. 2). Образование дефектов в области создания экситонов около бивакансий связано с захватом подвижных H-центров, созданных при распаде экситонов, бивакансиями кристаллов. Захват H-центров в бивакансиях является энергетически выгодным. По расчету [8], в этом случае происходит выигрыш энергии (—1.85 эВ).

Таким образом, обнаружено создание бивакансий в КВг при одноосном сжатии кристаллов. При излучательном распаде экситонов около этих бивакансий возникают новые полосы излучения с максимумами 2.75 и 3.1 эВ, а при безызлучательном распаде таких экситонов создаются радиационные дефекты.

Авторы выражают благодарность Ч. Б. Луцику за обсуждение материалов данной работы.

#### Список литературы

- [1] Луцик Н. Е., Маарос А. А., Никифорова О. А. и др. // Тр. ИФ АН ЭССР. 1987. Т. 61. С. 7—33.
- [2] Chiarotti G. // Phys. Rev. 1957. V. 107. N 2. P. 381—387.
- [3] Зайтов Ф. Н. // Тр. ИФ АН ЭССР. 1958. Т. 7. С. 254—275.
- [4] Тяпунина Н. А., Целебровский А. Н. // Кристаллография. 1973. Т. 18. № 3. С. 649—650.
- [5] Тайиров М. М. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 450—455; Тр. ИФ АН ЭССР. 1983. Т. 54. С. 73—101.
- [6] Сармуханов Е. Г., Шункеев К., Эланго А. А. // Материалы II Республ. конф. «Физика диэлектриков и полупроводников». Ош, 1990. С. 107—112.
- [7] Тайиров М. М., Ачекеев С. Ш. // Тез. докл. I Всес. совещ. «Физика, химия и технология люминофоров». Ставрополь, 1989. С. 56.
- [8] Гаврилов В. В., Гектин А. В., Серебрянный В. Я., Варакин А. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 303—305.

Ошский государственный педагогический институт

Поступило в Редакцию  
11 ноября 1990 г.  
В окончательной редакции  
15 апреля 1991 г.

## УПРУГИЕ МОДУЛИ ДИАРСЕНИДА ЦИНКА

В. Н. Балазюк, Г. Ю. Богачев, В. Я. Курячий, С. Ф. Маренкин,  
В. П. Мыхальченко, Д. И. Пищиков, А. И. Раренко

Монокристаллы диарсенида цинка  $Zn-As_2$  (моноклинная сингония, пространственная группа  $P2_1/c$  ( $C_{2h}^5$ ) [1]) выращены методом направленной кристаллизации из раствора по Бриджмену. Степень монокристалличности образцов устанавливалась рентгенопографическими методами.

Ультразвуковым импульсным методом с дискретной задержкой на частоте 10 МГц измерены скорости распространения упругих волн  $v_i$  ( $i=1\div 18$ ) различной поляризации вдоль шести неэквивалентных кристаллофизических направлений: [100], [010], [001], [101], [011], [110] при  $T=293$  К. Погрешности измерений  $v_i$  составляли величину не более 0.5 %. Ориентировка образцов и выбор направлений ортогональных осей производились рентгендифрактометрическим методом. Значения плотности монокристаллов  $\text{ZnAs}_2$   $\rho=5.245$  г/см<sup>3</sup>, определенные рентгенографически и методом гидростатического взвешивания, хорошо согласуются между собой и с литературными данными [2]. Следует отметить, что для некоторых значений скоростей упругих волн в отдельных образцах иногда наблюдался разброс, превышающий погрешность измерений, что может быть обусловлено наличием дефектов.

Известная процедура расчета компонент тензора упругих модулей  $C_{ij}$  и упругих податливостей  $S_{ij}$  (в обозначениях Фойгта) по измеренным  $v_i$  применительно к монокристаллам моноклинной симметрии проводилась на ЭВМ. При расчете компонент  $C_{22}$ ,  $C_{44}$ ,  $C_{66}$  относительная погрешность не превышает 1 %; для  $C_{11}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{13}$  — 2.5 %. Определение недиагональных компонент  $C_{23}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{15}$ ,  $C_{25}$ ,  $C_{35}$ ,  $C_{46}$  связано с громоздкими расчетами, величина погрешностей существенно возрастает. Для  $C_{23}$  и  $C_{12}$  погрешность порядка 6 %, в то время как для  $C_{15}$ ,  $C_{25}$ ,  $C_{35}$ ,  $C_{46}$  погрешность достигает и больших значений. Проверка самосогласованности экспериментальных значений  $v_i$  и рассчитанных  $C_{ij}$  по известной методике [3] показала, что максимальное их расхождение составляет не более 1.5 %.

Упругие модули  $\text{ZnAs}_2$

$ij$	$C_{ij}$ , ГПа	$S_{ij} \cdot 10^2$ , ГПа <sup>-1</sup>	$ij$	$C_{ij}$ , ГПа	$S_{ij} \cdot 10^2$ , ГПа <sup>-1</sup>
11	95.63	1.317	12	31.47	-0.286
22	102.48	1.149	13	41.06	-0.410
33	112.67	1.096	15	2.12	-0.419
44	20.76	4.821	23	28.48	-0.199
55	38.39	2.713	25	9.96	-0.307
66	40.45	2.474	35	-4.75	0.210
			46	-0.825	0.008

Численные значения компонент  $C_{ij}$  и  $S_{ij}$  (см. таблицу) сами по себе еще не дают достаточно наглядного представления анизотропии упругих свойств исследуемого кристалла. Поэтому нами рассчитаны все упругие параметры  $\text{ZnAs}_2$ : модуль Юнга  $E$ , линейная сжимаемость  $\chi$ , коэффициент Пуассона  $\mu$  вдоль главных кристаллографических направлений, а также объемная сжимаемость  $\chi_V$  и коэффициент всестороннего сжатия  $K$

$$\begin{aligned}
 E, \text{ ГПа: } & E_{100} = 75.93, E_{010} = 87.93, E_{001} = 91.24, \\
 \chi \cdot 10^2, (\text{ГПа})^{-1}: & \chi_{100} = 0.621, \chi_{100} = 0.644, \chi_{001} = 0.487, \\
 \chi_V = & 1.772 \cdot 10^2 (\text{ГПа})^{-1}, K = 56.43 \text{ ГПа}, \\
 \mu_{12} = & -E_{100} S_{12} = 0.22, \mu_{21} = -E_{010} R_{12} = 0.25, \\
 \mu_{13} = & -E_{100} S_{13} = 0.31, \mu_{31} = -E_{001} S_{13} = 0.37, \\
 \mu_{23} = & -E_{010} S_{23} = 0.17, \mu_{32} = -E_{001} S_{23} = 0.18.
 \end{aligned}$$

Из приведенных данных видно, что максимальная жесткость связи наблюдается вдоль направления [001] и минимальная — в [100] в соответствии с неравенствами:  $C_{33} > C_{22} > C_{11}$ ;  $E_{001} > E_{010} > E_{100}$  и  $S_{33} < S_{22} < S_{11}$ . Упругие модули  $C_{35}$  и  $C_{46}$  имеют отрицательные значения, что не противоречит теории упругости. Из представленных результатов видно, что монокристаллы дигарсенида цинка обладают четко выраженной анизотропией упругих свойств.

Численные значения  $C_{ij}$  позволяют оценить характер химической связи в решетке  $ZnAs_2$  исходя из отклонений от соотношений Коши [4]

$$q_{kk} = C_{ij} - C_{9-i, 9-i-j} \quad (i \neq j \neq k; i, j, k = 1, 2, 3),$$

представляющих собой тензор второго ранга. Из табл. 1 получим:  $q_{11} = 7.72$ ;  $q_{22} = 2.67$ ;  $q_{33} = -8.98$ ;  $q_{44} = 10.78$  в ГПа.

Как показано в [4], твердые тела, у которых модули поперечного противодействия превосходят модули сдвига, т. е. компоненты тензора  $q_{kk}$ , отрицательны, характеризуются либо направленными связями (ковалентными по своей природе), либо сильно зависящими от направления перекрытия электронных оболочек атомов в кристалле. С учетом абсолютных значений компонент тензора  $q_{kk}$  следует ожидать четко выраженной ковалентной связи в монокристалле диарсенида цинка вдоль направления [001] и ослабления ее в [010] и [100].

Учитывая характер анизотропии сил связи и параметров упругости, можно ожидать аналогичной зависимости от направления и других динамических свойств кристаллической решетки диарсенида цинка.

### Список литературы

- [1] Heet M. E. // Acta Cryst. 1974. V. 30. P. 122—126.
- [2] Глазов В. М., Касьмова М. К. // ДАН СССР. 1968. Т. 183. С. 141—143.
- [3] Александров К. С. // Кристаллография. 1958. Т. 3. С. 623—626.
- [4] Haussühl S. // Phys. Rendens. Mater. 1967. V. 6. P. 181—192.

Черновицкий государственный университет  
им. Ю. Федьковича

Поступило в Редакцию  
15 апреля 1991 г.

УДК 548 : 537.611

© Физика твердого тела, том 33, № 9, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 9, 1991

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ $LiCaAlF_6$ С ПРИМЕСЬЮ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ МЕТОДОМ ЭПР

И. Н. Куркин, Л. Л. Седов, Ш. И. Ягудин

Недавно опубликовано несколько работ по спектрально-люминесцентным и лазерным характеристикам монокристаллов  $LiCaAlF_6$ , активированных ионами  $Cr^{3+}$  [1-4], показана целесообразность дальнейших исследований ввиду перспективности практического применения данной системы. Однако каких-либо сведений по изучению  $LiCaAlF_6$  с примесью редкоземельных ионов ( $Re^{3+}$ ) нам неизвестно.

В настоящем сообщении мы приводим результаты исследования  $LiCaAlF_6 + Re^{3+}$  методом ЭПР.

Кристаллы  $LiCaAlF_6$  выращивались методом Бриджмена—Стокбаргера в атмосфере аргона. Сначала проводился твердофазный синтез химического соединения  $LiCaAlF_6$  в течение 12 ч при температуре 800 °С. Затем полученное соединение с добавкой редкоземельных ионов в количестве 1 % по отношению к кальцию насыщалось в графитовый тигель и загружалось в ростовую камеру. Скорость протяжки тигля составляла 2 мм/ч, а температура кристаллизации 850 °С.

Кристаллы  $LiCaAlF_6$  имеют тригональную симметрию  $D_{3d}^2$  [5]. Элементарная ячейка имеет параметры  $a = 4.996 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.366 \text{ \AA}$  и содержит две молекулы  $LiCaAlF_6$ . Ближайшее окружение катионов имеет симметрию  $D_3$  и представляет собой слабо искаженный октаэдр из ионов фтора. Плотность  $\rho = 3 \text{ г/см}^3$ . В  $1 \text{ см}^3$  содержится  $9.6 \cdot 10^{21}$  молекул  $LiCaAlF_6$ .