

УДК 538.955

© 1992

**ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЙ МЕХАНИЗМ
НЕЦЕНТРАЛЬНОСТИ ПРИМЕСНЫХ ИОНОВ
С ТРИПЛЕТНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ СОСТОЯНИЕМ**

B. C. Вихнин, A. C. Юрков

На основе гамильтониана, учитывающего линейную вибронную связь с тетрагональными искажениями решетки, квадратичное вибронное взаимодействие с полярными искажениями решетки, гармонические члены, интерференционный ангармонизм третьего порядка, а также ангармонизм полярных искажений четвертого порядка исследованы адиабатические потенциалы примесного иона с триплетным электронным состоянием. Найдено преобразование колебательных координат, позволяющее свести эффект квадратичного вибронного взаимодействия к эффекту совместного действия перенормированного ангармонизма и линейного вибронного взаимодействия. Показано, что колебательный потенциал примесного центра может иметь абсолютные минимумы, соответствующие нецентральному положению примесного иона. Получены условия существования минимумов потенциала симметрии D_{4h} , D_{3d} , C_{4v} , C_{3v} , C_{2v} и C_s . Показана возможность существования минимумов потенциала различной симметрии.

Нецентральные ионы являются модельными объектами в физике твердого тела для изучения природы локальных искажений в области дефектов и исследования туннелирования атомных частиц. Актуальный здесь вибронный механизм образования нецентральности обсуждался до настоящего времени в ситуациях псевдоэффекта Яна—Теллера [1–5] либо эффекта Яна—Теллера (ЭЯТ) в двукратно вырожденных состояниях локальных центров [6–8]. Между тем не менее важным является случай нецентральности в триплетном основном состоянии, который возможен в кубических кристаллах и реализуется экспериментально (например, в системах $\text{SrO} : \text{Co}^{2+}$ [9] и $\text{SrTiO}_3 : \text{Ti}^{3+}$ [10]). В связи с этим в настоящей работе проведено рассмотрение вибронного механизма нецентральности в основном триплетном состоянии, основанное на сильном квадратичном ЭЯТ на полярных искажениях. Получены возможные здесь типы многоядных потенциалов и равновесных искажений, а также критерии их реализации.

Исследование проводится на основе гамильтониана, включающего в себя линейное вибронное взаимодействие с тетрагональными искажениями окружения примеси, квадратичное вибронное взаимодействие с полярными искажениями, гармонические члены, интерференционный ангармонизм третьего порядка, ангармонизм четвертого порядка по полярным искажениям решетки. В работе найдено нелинейное преобразование колебательных координат, позволяющее исключить из гамильтониана члены, соответствующие квадратичному вибронному взаимодействию; при помощи процедуры Опика и Прайса исследован ряд возможных минимумов адиабатического потенциала. В приближении сильной вибронной связи с тетрагональными искажениями обнаружены области существования ян-теллеровских минимумов различной симметрии.

1. Вибронный гамильтониан
и ангармонические взаимодействия

Запишем гамильтониан примесного центра в виде суммы пяти слагаемых

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5. \quad (1)$$

Первое слагаемое описывает линейную вибронную связь с тетрагональными искажениями окружения примеси; второе — квадратичную связь с полярными искажениями, соответствующими смещению примесного иона из узла кристаллической решетки; третье — интерференционный ангармонизм третьего порядка; четвертое и пятое — упругую энергию, связанную с тетрагональными и полярными искажениями соответственно.

Матрируя (1) на волновых функциях триплетного терма и используя теорему Вигнера—Эккарта, гамильтониан можно выразить через известные матрицы коэффициентов Клебша—Гордана. Явный вид слагаемых гамильтониана дается формулами

$$H_1 = V_E (Q_{\vartheta} \varepsilon_{\vartheta} + Q_{\epsilon} \varepsilon_{\epsilon}) + V_T (Q_{xy} \varepsilon_{xy} + Q_{yz} \varepsilon_{yz} + Q_{xz} \varepsilon_{xz}), \quad (2)$$

$$\begin{aligned} H_2 = W_E & [(2Q_z^2 - Q_y^2 - Q_x^2) \varepsilon_{\vartheta} + \sqrt{3} (Q_x^2 - Q_y^2) \varepsilon_{\epsilon}] + \\ & + W_T (Q_x Q_y \varepsilon_{xy} + Q_y Q_z \varepsilon_{yz} + Q_x Q_z \varepsilon_{xz}), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} H_3 = & \{ U_E [Q_{\vartheta} (2Q_z^2 - Q_y^2 - Q_x^2) + \sqrt{3} Q_{\epsilon} (Q_x^2 - Q_y^2)] + \\ & + U_T (Q_{xy} Q_x Q_y + Q_{yz} Q_y Q_z + Q_{xz} Q_x Q_z) \} \varepsilon_A, \end{aligned} \quad (4)$$

$$H_4 = [(\omega_E^2/2) (Q_{\vartheta}^2 + Q_{\epsilon}^2) + (\omega_T^2/2) (Q_{xy}^2 + Q_{yz}^2 + Q_{xz}^2)] \varepsilon_A, \quad (5)$$

$$H_5 = [(K/2) (Q_x^2 + Q_y^2 + Q_z^2) + (L_1/4) (Q_x^4 + Q_y^4 + Q_z^4) + (L_2/2) (Q_x^2 Q_y^2 + Q_y^2 Q_z^2)] \varepsilon_A, \quad (6)$$

где Q_x, Q_y, Q_z — декартовы компоненты смещения примесного иона из узла кристаллической решетки; $Q_{\vartheta}, Q_{\epsilon}, Q_{xy}, Q_{yz}, Q_{xz}$ — симметризованные смещения атомов окружения примеси, преобразующиеся по представлениям E_g и T_{2g} группы O_h и обладающие трансформационными свойствами: $Q_{\vartheta} \sim (3Z^2 - r^2)/\sqrt{3}$, $Q_{\epsilon} \sim X^2 - Y^2$, $Q_{xy} \sim 2XY$, $Q_{yz} \sim 2YZ$, $Q_{xz} \sim 2XZ$; $\varepsilon_{\vartheta}, \varepsilon_{\epsilon}, \varepsilon_{xy}, \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{xz}$ — матрицы коэффициентов Клебша—Гордана, явный вид которых приведен в [11]; ε_A — единичная матрица; $V_E, V_T, W_E, W_T, U_E, U_T, \omega_E, \omega_T, K, L_1, L_2$ — параметры взаимодействий.

Отметим, что вибронный гамильтониан H_2 квадратичного вибронного взаимодействия феноменологически учитывает все вибронные взаимодействия, приводящие к квадратичным по полярным искажениям вкладам в адиабатический потенциал исследуемого триплета, в том числе и связанные с линейным псевдоэффектом Яна—Теллера. В связи с этим вибронные параметры W_E и W_T включают в себя вклады как собственно квадратичного вибронного взаимодействия триплета, так и линейного псевдоэффекта Яна—Теллера.

Непосредственным вычислением легко убедиться, что при преобразовании тетрагональных смещений (новые координаты с тильдой, α_E и α_T — параметры преобразования)

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{xy} &= Q_{xy} + \alpha_T Q_x Q_y, \\ \tilde{Q}_{yz} &= Q_{yz} + \alpha_T Q_y Q_z, \\ \tilde{Q}_{xz} &= Q_{xz} + \alpha_T Q_x Q_z, \\ \tilde{Q}_{\vartheta} &= Q_{\vartheta} + \alpha_E (2Q_z^2 - Q_y^2 - Q_x^2), \\ \tilde{Q}_{\epsilon} &= Q_{\epsilon} + \alpha_E \sqrt{3} (Q_x^2 - Q_y^2), \end{aligned} \quad (7)$$

гамильтониан (1) сохраняет свою форму, происходит только перенормировка его параметров W_E , W_T , U_T , U_T , L_1 , L_2 . Выбирая соответствующим образом параметры преобразования (7), можно обратить в нуль любую пару из величин \tilde{U}_E , \tilde{U}_T , \tilde{W}_E , \tilde{W}_T . Так как легче иметь дело с диагональным по электронным степеням свободы интермодуляционным ангармонизмом, целесообразно положить \tilde{W}_E и \tilde{W}_T равным нулю. При таком выборе параметров a_E и a_T перенормированные параметры гамильтониана связаны с исходными формулами

$$\begin{aligned}\tilde{U}_E &= U_E - W_E \omega_E^2 / V_E, \\ \tilde{U}_T &= U_T - W_T \omega_T^2 / V_T, \\ \tilde{L}_1 &= L_1 + 8W_E^2 \omega_E^2 / V_E^2 - 16W_E U_T / V_E, \\ \tilde{L}_2 &= L_2 + W_T^2 \omega_T^2 / V_T^2 - 2W_T U_T / V_T - 4W_E^2 \omega_E^2 / V_E^2 + 8W_E U_E / V_E.\end{aligned}\quad (8)$$

Далее будем считать, что квадратичное вибронное взаимодействие исключено преобразованием (7), тильду над колебательными координатами и параметрами гамильтониана будем опускать.

2. Геометрия многоядерных потенциалов примесных центров в триплетном состоянии

Как известно, вдали от точки электронного вырождения адиабатические потенциалы ян-тэллеровской системы имеют смысл потенциальной энергии ядер в поле электронов [11]. Поэтому анализ адиабатических потенциалов позволяет сделать некоторые выводы о динамике ядер и физических свойствах рассматриваемой системы. При этом наиболее важной является информация о положениях минимумов потенциала и кривизне потенциальной гиперповерхности вблизи этих минимумов.

В связи с тем что гамильтониан (1) содержит ангармонические члены, методом Опика—Прайса [2] удается найти в аналитической форме только часть возможных экстремумов потенциала и только для некоторых из найденных экстремумов получить обозримые условия, при выполнении которых экстремумы являются минимумами [13]. Тем не менее анализ методом Опика—Прайса позволяет сделать вывод, что возможно существование минимумов потенциала симметрий D_{4h} , D_{3d} (центральное положение примеси), C_{4v} , C_{3v} , C_{2v} (некентральное положение примеси), а также существование минимумов симметрий C_{4v} и D_{3d} , C_{2v} и D_{3d} , C_{3v} и D_{4h} .

Достаточно полный анализ адиабатического потенциала, соответствующего гамильтониану (1), можно провести лишь в частном случае, когда энергия, соответствующая линейному эффекту Яна—Теллера, существенно больше энергии, связанной с нецентральностью.

В связи с тем что H_1 и H_3 диагональны, адиабатический потенциал примесного центра можно представить в виде

$$\begin{aligned}E = E_{OP} + U_E [Q_z (2Q_z^2 - Q_y^2 - Q_x^2) + \sqrt{3} Q_e (Q_x^2 - Q_y^2)] + \\ + U_T (Q_{xy} Q_x Q_y + Q_{yz} Q_y Q_z + Q_{xz} Q_x Q_z) + (K/2) (Q_z^2 + Q_y^2 + Q_x^2) + \\ + (L_1/4) (Q_x^4 + Q_y^4 + Q_z^4) + (L_2/2) (Q_x^2 Q_y^2 + Q_y^2 Q_z^2),\end{aligned}\quad (9)$$

где E_{OP} — адиабатический потенциал, соответствующий гамильтониану $H_1 + H_4$ и зависящий только от тетрагональных смещений и исследований Опиком и Прайсом в работе [12].

Минимумы потенциала (9) можно найти, основываясь на следующих соображениях. Известно, что потенциал E_{OP} имеет несколько ям тригонального или тетрагонального типа в зависимости от значения параметра $\eta = (3V_E^2 / \omega_E^2) /$

$(4V_T^2/\omega_E^2)$. Если $\eta > 1$, то реализуются минимумы E_{OP} тетрагонального типа, в противном случае — тригонального типа. При наличии полярных искажений тетрагональные искажения, соответствующие минимуму потенциала (9), вообще говоря, не будут совпадать с тетрагональными искажениями, соответствующими минимуму потенциала E_{OP} . Это объясняется тем, что на тетрагональные степени свободы действуют силы, обусловленные интермодуляционным ангармонизмом третьего порядка. Тем не менее, если ямы потенциала E_{OP} достаточно глубоки или малы полярные искажения, то в подпространстве тетрагональных смещений минимумы потенциала (9) будут находиться вблизи минимумов потенциала E_{OP} . Этот факт позволяет провести упрощение потенциала примесного центра, разложив E_{OP} в ряд Тейлора вблизи одного из его минимумов и ограничиться членами второго порядка. Критерием применимости такого разложения является малое отклонение потенциала от его значения в минимуме по сравнению с высотой потенциальных барьеров между отдельными ямами потенциала E_{OP} .

После указанного разложения потенциал примесного центра приобретает вид формы второго порядка по тетрагональным смещениям, причем коэффициенты при квадратичных членах этой формы не зависят от полярных смещений. Это позволяет исключить взаимодействие полярных и тетрагональных искажений при помощи преобразования сдвига тетрагональных координат и тем самым перейти к эффективному потенциальному, зависящему только от полярных смещений.

В случае, когда $\eta > 1$ потенциал E_{OP} имеет три ямы тетрагонального типа. Проводя разложение вблизи минимума, симметричного относительно оси [001], получаем потенциал в виде

$$E = E_0 + A_1 Q_z^2 + B_1 Q_y^2 + C_1 Q_x^4 + D_1 Q_p^4 + F_1 Q_z^2 Q_p^2 + G_1 Q_p^4 \cos 4\varphi, \quad (10)$$

где

$$E_0 = V_E^2/2\omega_E^2, \quad Q_p = (Q_x^2 + Q_y^2)^{1/2}, \quad \varphi = \arctg(Q_y/Q_x),$$

$$A_1 = K/2 + (2U_E V_E)/\omega_E^2, \quad B_1 = K/2 - (U_E V_E)/\omega_E^2,$$

$$C_1 = L_1/4 - 2U_E^2/\omega_E^2, \quad D_1 = (3L_1 + L_2)/16 - 5U_E^2/(4\omega_E^2) - U_T^2/(16\omega_T^2),$$

$$F_1 = L_1/2 + 2U_E^2/\omega_E^2 - U_T^2/(2\omega_T^2),$$

$$G_1 = (L_1 - L_2)/16 - 3U_E^2/(4\omega_E^2) + U_T^2/(16\omega_T^2).$$

Для того чтобы потенциал (10) был физически допустимым, необходимо, чтобы он был ограничен снизу. Для этого должны выполняться неравенства

$$C_1 > 0, \quad D_1 - |G_1| > 0, \quad F_1 > -2|C_1(D_1 - |G_1|)|^{1/2}. \quad (11)$$

Если эти неравенства не выполняются, то используемого в настоящей работе ангармонизма четвертого порядка не достаточно для стабилизации искажений, вызванных интермодуляционным ангармонизмом третьего порядка.

Минимумы потенциала (10) находятся обычным образом и перечислены в таблице. Необходимо отметить, что в этой таблице указаны координаты только одного минимума каждого типа. Координаты остальных минимумов находятся с помощью преобразований группы O_h . При этом минимумы симметрии C_{4v} оказываются шестикратными, симметрии C_{2v} — двенадцатикратными и симметрии C_s — двадцатичетырехкратными.

В случае, когда $\eta < 1$, потенциал E_{OP} имеет четыре ямы тригонального типа. При этом эффективный потенциал удобно записывать в цилиндрических координатах с осью в направлении [111]

$$E = E_0 + A_2 Q_U^2 + B_2 Q_A^2 + C_2 Q_U^2 + D_2 Q_A^2 + F_2 Q_U^2 Q_A^2 + G_2 Q_U Q_A^3 \cos 3\varphi, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned}
 E_0 &= 2V_T^2/(3\omega_T^2), \quad Q_U = (Q_x + Q_y + Q_z)/\sqrt{3}, \\
 Q_A &= (Q_x^2 + Q_y^2)^{1/2}, \quad Q_1 = (2Q_z - Q_y - Q_x)/\sqrt{6}, \\
 Q_2 &= (Q_x - Q_y)/\sqrt{2}, \quad \varphi = \arctg(Q_2/Q_1), \\
 A_2 &= K/2 + 2U_T V_T/(3\omega_T^2), \quad B_2 = K/2 - U_T V_T/(3\omega_T^2), \\
 C_2 &= (L_1 + 2L_2)/12 - U_T^2/(6\omega_T^2), \\
 D_2 &= (L_1 + L_2)/8 - [U_T^2(4 - 3\eta)/\omega_T^2 + 12U_E^2/\omega_E^2 - 6U_E U_T V_E/(V_T \omega_E^2)]/[24(1 - \eta)], \\
 F_2 &= L_1/2 - [8U_E^2/\omega_E^2 + U_T^2/(6\omega_T^2) + 2U_E U_T V_E/(V_T \omega_E^2)], \\
 G_2 &= \{L_1 - L_2 - 3[4U_E^2/\omega_E^2 - U_T^2(3 - 2\eta)/(6\omega_T^2) - U_E U_T V_E/(2V_T \omega_E^2)]\}/(3\sqrt{2}).
 \end{aligned}$$

Условия, при которых потенциал (12) ограничен снизу, можно задать неравенствами

$$C_2 > 0, \quad D_2 > 0, \quad F_2 > -2(C_2 D_2)^{1/2}, \quad |G_2| < G_{\text{cr}}, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned}
 G_{\text{cr}} &= 4C_2 \xi^3 + 2F_2 \xi, \\
 \xi &= ([|F_2|/(6C_2)](1 + 12C_2 D_2/F_2^2)^{1/2} - F_2/(6C_2))^{1/2}.
 \end{aligned}$$

В приведенных выражениях подразумевается положительная ветвь квадратного корня.

Так как Q_A — положительно определенная величина, потенциал (10) инвариантен относительно замены $Q_U \rightarrow -Q_U$, $\varphi \rightarrow \varphi + \pi/3$. Поэтому без ограничения общности мы можем рассматривать только неотрицательные значения Q_U .

№ п/п	Симметрия	Координаты	Условия, при которых экстремум является минимумом
1	C_{4v}	$Q_x = Q_y = 0, \quad Q_z = [-A_1/2C_1]^{1/2}$	$A_1 < 0, \quad 2C_1 B_1 > F_1 A_1$
2	C_{2v}	$Q_y = Q_z = 0, \quad Q_x = [-B_1/[2(D_1 + G_1)]]^{1/2}$	$G_1 < 0, \quad B_1 < 0, \quad 2A_1 D_1 > B_1 F_1$
3	C_{2v}	$Q_z = 0, \quad Q_x = Q_y = [-B_1/[4(D_1 - G_1)]]^{1/2}$	$G_1 > 0, \quad B_1 < 0, \quad 2A_1 D_1 > B_1 F_1$
4	C_s	$Q_x = Q_y = [(2C_1 B_1 - A_1 F_1)/[2F_1^2 - 8C_1(D_1 - G_1)]]^{1/2},$ $Q_z = [2A_1(D_1 - G_1) - B_1 F_1]/[F_1^2 - 4C_1(D_1 - G_1)]^{1/2}$	$G_1 > 0, \quad 2C_1 B_1 < A_1 F_1, \quad F_1 < -2[C_1(D_1 - G_1)]^{1/2}, \quad 2A_1(D_1 - G_1) < B_1 F_1$
5	C_s	$Q_x = [(2C_1 B_1 - A_1 F_1)/[F_1^2 - 4C_1(D_1 + G_1)]]^{1/2}, \quad Q_y = 0,$ $Q_z = [2A_1(D_1 + G_1) - B_1 F_1]/[F_1^2 - 4C_1(D_1 + G_1)]^{1/2}$	$G_1 < 0, \quad 2C_1 B_1 < A_1 F_1, \quad F_1 < -2[C_1(D_1 + G_1)]^{1/2}, \quad 2A_1(D_1 + G_1) < B_1 F_1$
6	D_{4h}	$Q_x = Q_y = Q_z = 0$	$A_1 > 0, \quad B_1 > 0$

Чтобы упростить записи, будем считать, что $A_2 > 0$, $B_2 > 0$. При этом минимумам потенциала соответствуют значения $\varphi = 0$ при $G_2 < 0$ и $\varphi = \pi/3$ при $G_2 > 0$. При этих значениях φ потенциал можно записать в виде

$$E = E_0 + A_2 Q_U^2 + B_2 Q_A^2 + C_2 Q_U^4 + D_2 Q_A^4 + F_2 Q_A^2 Q_U^2 - |G_2| Q_U Q_A^3. \quad (14)$$

Потенциал (14) может иметь минимумы в точках, соответствующих симметрии примесного центра D_{3d} , C_{3v} и C_s . Минимумы симметрии D_{3d} ($Q_A = Q_U = 0$) реализуются при $A_2 > 0$, $B_2 > 0$; минимумы симметрии C_{3v} ($Q_A = 0$, $Q_U = [-A_2/(2C_2)]^{1/2} \neq 0$) — при $A_2 < 0$, $2B_2 C_2 > F_2 A_2$. Координаты экстремумов симметрии C_s определяются формулами

$$Q_U = [2A_2/(|G_2|X^3 - 2F_2X^2 - 4C_2)]^{1/2},$$

$$Q_A = Q_U X,$$

где X — корень уравнения

$$X^3 + [4D_2A_2/(B_2|G_2|) - 2F_2/|G_2|]X^2 +$$

$$+ (3A_2/B_2)X + [2F_2A_2/(B_2|G_2|) - 4C_2/|G_2|] = 0.$$

Экстремум симметрии C_s является минимумом адиабатического потенциала примесного центра, если при соответствующих значениях Q_U и Q_A выполняются неравенства

$$A_2 + 6C_2Q_U^2 + F_2Q_A^2 > 0,$$

$$4(A_2 + 6C_2Q_U^2 + F_2Q_A^2)(B_2 + 6D_2Q_A^2 + F_2Q_U^2 - 3|G_2|Q_UQ_A) -$$

$$- (4F_2Q_UQ_A - 3|G_2|Q_A^2) > 0.$$

3. Существование минимумов различной симметрии. Обсуждение результатов

Представляет интерес то обстоятельство, что потенциал (14) допускает возможность существования минимумов симметрии C_{3v} и C_s . Для того чтобы показать это, рассмотрим выражение (14) при $Q_U \gg Q_A$. Заменив Q_U на значение, соответствующее минимуму потенциала при $Q_A=0$, получим

$$E = PQ_A^2 - RQ_A^3 + D_2Q_A^4, \quad (15)$$

где $P = [B_2 - F_2A_2/(2C_2)]$, $R = |G_2|[-A_2/(2C_2)]^{1/2}$; члены, не зависящие от Q_A , опущены. Потенциал (15) имеет два минимума, если $0 < P < 9R^2/(32D_2)$. Координаты этих минимумов определяются формулами

$$Q_{A1} = 0,$$

$$Q_{A2} = 3R/(8D_2) + [9R^2/(64D_2) - P/2D_2]^{1/2}.$$

При $Q_A = 3R/(8D_2) - [9R^2/(64D_2) - P/2D_2]^{1/2}$ имеется седловая точка.

Аналогичное рассмотрение показывает, что возможно существование не только минимумов симметрии C_{3v} и C_s , но и симметрии C_{4v} и D_{3d} , C_{2v} и D_{3d} , C_{2v} и D_{4h} .

Одни из важных примеров триплетных состояний локальных центров в кристаллах — нецентральный парамагнитный ион Co^{2+} в SrO , который является модельным для исследования туннелирования атомных частиц [14]. Полученный в настоящей работе восьмиямный потенциал XY_8 с локальной симметрией в каждом минимуме C_{3v} соответствует эксперименту для Co^{2+} в SrO . Однако исследования спиновой поляризации, индуцированной туннелированием, показали [14], что в этом случае спин-орбитальный матричный элемент λ весьма мал ($\sim 10^5$ Гц), что указывает на значительную вибронную редукцию спин-орбитального взаимодействия. При локализации центра в отдельном минимуме симметрии C_{3v} в условиях отмеченной выше сильной вибронной редукции спин-орбитального взаимодействия реализуется спин $S=3/2$. С другой стороны, в ЭПР экспериментах проявляется эффективный спин $S=1/2$. Для объяснения этого факта можно было бы опираться на существенное спин-орбитальное взаимодействие, приводящее к мультиплетам с $J=1/2$, $J=3/2$ и $J=5/2$, однако это, как отмечалось выше, противоречит экспериментам по туннельной спиновой поляризации. Таким образом, построение модели нецентрального парамагнитного иона Co^{2+} в SrO требует дополнительных экспериментальных и теоретических исследований. Тем не менее проведенное здесь рассмотрение вибронного механизма нецентральности представляется необходимой основой для построения модели такого центра.

Список литературы

- [1] Берсукер И. Б. // ТЭХ. 1980. Т. 16. С. 291—299.
- [2] Берсукер И. Б., Полингер В. З., Берсукер Г. И., Горинчай Н. Н. // Журнал физ. химии. 1987. Т. 61. С. 784—791.
- [3] Дейген М. Ф., Глинчук М. Д. // УФН. 1974. Т. 114. С. 185—211.
- [4] Берсукер Г. И., Полингер В. З., Хлопин В. П. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 8. С. 2471—2476.
- [5] Шашкин С. Ю., Никифоров А. Е. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 1. С. 118—125.
- [6] Вихнин В. С. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 8. С. 2441—2443.
- [7] Вихнин В. С. // Хим. физика. 1982. № 9. С. 1239—1243.
- [8] Вихнин В. С. // Тез. докл. VIII Всес. феофиловский симпозиум по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов. Свердловск, 1985. Ч II. С. 67.
- [9] Manson N. B., Edgar A. // Semicond. and Insulators. 1978. V. 3. P. 209—226; Толпаров Ю. Н., Крылов В. А., Сочава Л. С. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 10. С. 3090—3094.
- [10] Schirmer O. F., Muller K. A. // Phys. Rev. 1973. V. B7. P. 2986—2995.
- [11] Берсукер И. Б., Полингер В. З. Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. М.: Наука, 1983.
- [12] Opic U., Pruse M. H. L. // Proc. Roy. Soc. A. 1957. V. 238. P. 425.
- [13] Вихнин В. С., Юрков А. С. // Тез. докл. IX Всес. симпозиума по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов. 1990. С. 46.
- [14] Бурсиан В. Э., Вихнин В. С., Сочава Л. С. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1988. Т. 52. С. 477—481.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
30 августа 1991 г.