

УДК 535.37

© 1992

## КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОБРАЗОВАНИЮ ДЕФЕКТНЫХ СОСТОЯНИЙ В ГАДОЛИНИЙ-ГАЛЛИЕВЫХ ГРАНАТАХ

Я. О. Довгий, И. В. Китык, А. О. Матковский,  
Д. Ю. Сузак, С. Б. Убизский

С помощью самосогласованного метода нелокального псевдопотенциала, сберегающего норму, проведены расчеты зонной структуры и распределения электронной плотности кристаллов гадолиний-галлиевого граната. Обнаружены наиболее вероятные типы дефектов и возможные пути их миграции. Проведены количественные оценки энергий их образования, а также возможной концентрации под действием различных типов возбуждений.

Монокристаллы со структурой гранатов находят все более широкое применение в квантовой электронике и микроэлектронике. Гадолиний-галлиевые гранаты (ГГГ) используются в качестве подложечного материала для эпитаксиального выращивания феррогранатовых пленок, а также в качестве лазерных матриц. Они удовлетворяют таким важным требованиям, как высокая прозрачность в видимой и ближней ИК областях спектра, оптическая и радиационная стойкость. В работе анализируется природа генетических (ростовых) и радиационных дефектов в кристаллах ГГГ. Развита квантовохимический подход к проблеме радиационного дефектообразования в сложных оксидных кристаллах.

Вопросы образования дефектных состояний в сложных оксидных кристаллах (прежде всего под действием радиации) традиционно обсуждаются на феноменологическом уровне. Однако такие описательные подходы не дают возможности однозначно указать на механизмы происхождения тех или иных дефектов, построить их микроскопические модели. Следует признать, что главным препятствием на пути построения количественной теории дефектообразования является то обстоятельство, что до сих пор отсутствуют надежные данные о распределении электронной плотности в кристаллах, что в свою очередь обусловлено сложностью проведения зонных расчетов для столь сложных элементарных ячеек.

В настоящей работе с целью изучения процесса формирования радиационных дефектов в кристаллах ГГГ проведены расчеты зонной структуры, распределения электронной плотности и на их основе предпринята попытка определить типы дефектных конфигураций, с наибольшей вероятностью реализующиеся в облученном кристалле. Приводятся также количественные оценки концентрации радиационных дефектов.

Проблема расчета электронного спектра кристаллов в каждом случае сводится к решению уравнения Шредингера

$$[\hat{T} + V_{ps}(\mathbf{r})]\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = E_{nk} \Psi_{nk}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

т. е. к нахождению собственных функций  $\Psi_{nk}(\mathbf{r})$  электронов и собственных значений энергии  $E_{nk}$  в зоне  $n$ . В уравнении (1)  $\hat{T}$  — оператор кинетической

энергии;  $V_{ps}(r)$  — самосогласованный потенциал кристалла;  $k$  — волновой вектор, характеризующий состояния электронов в зоне.

В качестве простейшего и наиболее удобного базиса нами выбраны плоские волны

$$\Psi_{nk}(r) = \sum_{\mathbf{G}} d_{n\mathbf{G}}(k) \exp [i(\mathbf{k} + \mathbf{G})r], \quad (2)$$

нормированные на объем кристалла  $\Omega = N_c V$ , состоящего из  $N_c$  элементарных ячеек объема  $V$ .

Используя равенства (1) и (2), можно найти математическое ожидание собственного значения энергии электрона

$$E_{nk} = \frac{\int \Psi_{nk}^*(r) \hat{H} \Psi_{nk}(r) dr}{\int \Psi_{nk}^*(r) \Psi_{nk}(r) dr}. \quad (3)$$

В основном состоянии  $E_{nk}$  стремится к минимуму, поэтому минимизируем  $E_{nk}$  по неизвестным коэффициентам  $d_{n\mathbf{G}}^*(k)$ . Необходимым условием минимума  $E_{nk}$  является совокупность уравнений

$$\frac{\partial E_{nk}}{\partial a^*(k)} = 0, \quad (4)$$

число которых для каждого  $(nk)$  равно числу плоских волн (2) в разложении. Система уравнений (4) однородна относительно искомым коэффициентов  $d_{n,\mathbf{G}}^*(k)$ . Ее нетривиальное решение существует при условии

$$\|[(\mathbf{k} + \mathbf{G}_i)^2 - E_{n,\mathbf{k}}] \delta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j} + \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_i | V_{ps}(r) | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle\| = 0. \quad (5)$$

Центральным здесь является расчет матричного элемента на базисе плоских волн.

В общих чертах данный подход основан на самосогласованном нахождении псевдопотенциала в приближении функционала локальной спиновой плотности. Исходным пунктом является система уравнений Дирака для компонент волновой функции  $G_e(r)$  и  $F_e(r)$  [1]

$$\begin{aligned} \frac{dE_l(r)}{dr} - \frac{g}{r} F_l(r) + \alpha [\varepsilon_l - V(r)] G_l(r) &= 0, \\ \frac{dG_l(r)}{dr} + \frac{g}{r} G_l(r) + \alpha \left[ \frac{2}{\alpha^2} + \varepsilon_l - V(r) \right] F_l(r) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $C = \alpha^{-1} = 137.07$ ;  $g$  — целое ненулевое число

$$g = \begin{cases} l, & j = l - 1/2, \\ -(l + 1), & j = l + 1/2, \end{cases} \quad (7)$$

$l$  и  $j$  — орбитальный и полный моменты соответственно. Плотность выражена через компоненты волновой функции после решения системы уравнений (6)

$$\rho(r) = \sum_l [ |G_l(r)|^2 + |F_l(r)|^2 ]. \quad (8)$$

Введенный нами, исходя из модели [1], псевдопотенциал имеет сложный вид

$$V_l^{\text{ион}}(r) = V_{\text{ост}}(r) + \Delta V_l(r), \quad (9)$$

где

$$V_{\text{ост}}(r) = -\frac{Zve^2}{l} \sum_{i=1}^2 c_i^{(\text{oc})} \text{erf} [(\alpha_i^{\text{oc}})^{1/2} r], \quad (10)$$

$Z_v$  — заряд валентных электронов,

$$\Delta V_l^{\text{ион}}(r) = \sum_{j=1}^3 (A_j + r^2 A_{j+3}) \exp(-\alpha_j r^2). \quad (11)$$

Подробную процедуру нахождения соответствующих коэффициентов можно найти в работе [2].

Полный псевдопотенциал  $V_{ps}(r)$  представляет собой сумму перекрывающихся нелокальных псевдопотенциалов, расположенных в точках  $\tau_{\alpha,\nu}$ . Взаимодействие электрона с остовой решеткой, описываемой периодическими ионными псевдопотенциалами, определяется оператором

$$V_{ps}(r, r') = \sum_{j, \alpha, \nu} V_{\alpha}(r - R_j - \tau_{\alpha,\nu}; r - R_j - \tau_{\alpha,\nu}), \quad (12)$$

где  $R_j$  — вектор прямой решетки, определяющий положение элементарной ячейки;  $\tau_{\alpha,\nu}$  — вектор, определяющий положение иона  $\nu$  сорта  $\alpha$  в элементарной ячейке. При вычислении матричных элементов в уравнении (5) в базе плоских волн необходимо осуществить Фурье-преобразование от  $r$ -пространства в обратное  $q$ -пространство. Тогда

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_j | V_{ps}(r, r') | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle = \\ & = \sum_{\alpha, \nu} \exp[-i(\mathbf{q}\tau_{\alpha,\nu})] \frac{1}{V} \int dr \exp(-i\mathbf{G}r) V_{\alpha}(r). \end{aligned} \quad (13)$$

Рассмотрим локальную часть потенциала  $V_0(r)$ . При этом запишем вначале разложение плоской волны по Рэлею

$$\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(\mathbf{q}r) P_l(\cos \theta_{\hat{\mathbf{q}}}), \quad (14)$$

где  $j_l(x)$  — сферические функции Бесселя,  $P_l(\cos \theta_{\hat{\mathbf{q}}})$  — полиномы Лежандра порядка  $l$ ,  $\theta_{\hat{\mathbf{q}}}$  — угол между векторами  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{r}$ , а также учтем, что  $P_0(\cos \theta_{\hat{\mathbf{q}}}) = 1$ .

Получим

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{V} \int_0^{\infty} r^2 \left\{ -\frac{Zve^2}{r} \sum_{i=1}^2 c_i^{(\infty)} \operatorname{erf} [(\alpha_i^{(\infty)})^{1/2} r] + \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^3 (A_l^{(l)} + r^2 A_{l+3}^{(l)}) \exp(-\alpha_l^{(l)} r^2) \right\} j_0(\mathbf{q}r) dr. \quad (15)$$

Форм-фактор от нелокальной части псевдопотенциала вычисляется по формуле

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_j | V_{NL}^2(r, r') | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle = \frac{1}{V} \int dr' \exp[-i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_j) \mathbf{r}] \times \\ \times \sum_{l=1}^3 \sum_{i=1}^3 [(A_l^{(l)} + r^2 A_{l+3}^{(l)}) \exp(-\alpha_l^{(l)}(r^2) - (A_l^{(0)} + r^2 A_{l+3}^{(0)}) \times \\ \times \exp(-\alpha_l^{(0)} r^2)] \hat{P}_l | \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_j) \mathbf{r}]. \quad (16)$$

После ряда преобразований получим

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_j | V_{NL}(r, r') | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle = \frac{4\pi}{V} \sum_{l=1}^2 (2l+1) \hat{T}_l P_l [\cos \theta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j}], \quad (17)$$

где

$$\cos \theta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j} = \frac{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j}{|\mathbf{G}_i| |\mathbf{G}_j|}, \quad P_1 = \cos \theta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j}, \quad P_2 = \frac{3}{2} \cos^2 \theta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j} - \frac{1}{2}, \\ \hat{T}_l = \sum_{i=1}^3 [A_i^{(l)} M_1^{(l)} + A_{i+3}^{(l)} M_2^{(l)} - A_i^{(0)} M_1^{(0)} - A_{i+3}^{(0)} M_2], \\ M_1^l = \int_0^{\infty} r^2 j_l(\mathbf{G}_i r) \exp(-\alpha_i^l r^2) j_l(\mathbf{G}_j r) dr, \\ M_2^l = \int r^4 j_l(\mathbf{G}_i r) \exp(-\alpha_i^l r^2) j_l(\mathbf{G}_j r) dr. \quad (18)$$

При выполнении самосогласованных расчетов необходимо учитывать кристаллический экранирующий потенциал Хартри-Слэтера. Потенциал Хартри  $V_H$ , как обычный кулоновский потенциал электронного заряда, определяется из уравнения Пуассона

$$\nabla^2 V_H(r) = -4\pi e^2 \rho(r), \quad (19)$$

где  $\rho(r) = \sum_n |\Psi_{n,k}(r)|^2 dk$  — электронная плотность. Фурье-образ кулоновского экранировочного потенциала

$$V_H(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) = \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|} \rho(|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|),$$

где

$$\rho(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \rho(\mathbf{r}) \exp[-i[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \mathbf{r}]]. \quad (20)$$

Кроме того, очень существенным является учет обменно-корреляционного потенциала, имеющего после преобразования Фурье форму

$$V_{\text{ок}}(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) = -3e^2\beta \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\rho(\mathbf{r}_i)]^{1/3} \exp[-i(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \mathbf{r}_i]. \quad (21)$$

В результате матричные элементы эрмитовой матрицы, представляющей собой одноэлектронный гамильтониан, определяются выражением

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_i | \hat{H} | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle = (\mathbf{k} + \mathbf{G}_i) \delta_{\mathbf{G}_i \mathbf{G}_j} + \sum_{\alpha} S^{(\alpha)}(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) [v_{\alpha}(|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|) + \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_i | V_{NL}^{\alpha} | \mathbf{k} + \mathbf{G}_j \rangle] + V_H(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) + V_{\text{ок}}(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j). \quad (22)$$

Структурный фактор иона типа  $\alpha$  равен

$$S^{(\alpha)}(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) = \frac{1}{N_{\text{гр}}} \sum_{\nu} \exp[-i(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \mathbf{r}_{\alpha, \nu}]. \quad (23)$$

При этом для начала самосогласованных расчетов важно выбрать некоторую исходную плотность валентных электронов ГГГ, представляющую собой суперпозицию плотностей электронов, находящихся на валентных орбиталях невзаимодействующих нейтральных атомов, расположенных в элементарной ячейке на местах соответствующих ионов [3]

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha, n, l} n_{\alpha, n, l} \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad (24)$$

где  $n_{\alpha, n, l}$  — число заполнения орбитали  $n_l$  атома  $\alpha$ . Волновая функция каждой орбитали берется в виде

$$\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{P_{nl}^{\alpha}(\mathbf{r})}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (25)$$

Для получения полной плотности валентных электронов в точке  $\mathbf{r}$ , необходимо для расчета Фурье-образов кулоновского и обменно-корреляционного потенциалов (21) — (22) рассчитать  $\rho(\mathbf{r})$  по всем валентным зонам  $N_{vz}$  и различным состояниям  $\mathbf{k}$  в первой зоне Бриллюэна (ЗБ). Число этих состояний всегда равно  $N_c$ . В результате получим

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_{vz}} \sum_{j=1}^{N_c} \rho_n \mathbf{k}_j(\mathbf{r}). \quad (26)$$

Рис. 1. Структурный фрагмент монокристаллов  $Gd_3Ga_5O_{12}$  с обозначениями различных локальных позиций кислорода.

Общее число заполненных валентных зон равно

$$N_{vz} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} Z_{\alpha} N_{\alpha}. \quad (27)$$

Вклад в электронную плотность от функции Блоха  $a_G(n, k)$  заполненной валентной зоны равен

$$\rho_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{2}{V} \left( \sum_G a_G(n, k) \exp[-(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}] \times \right. \\ \left. \times \sum_G d_G(n, k) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}] \right). \quad (28)$$

Выражение (21) можно записать и по-другому

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_{vz}} \langle N_c \rho_{nk}(\mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{k}}, \quad (29)$$

где символ  $\langle \rangle_{\mathbf{k}}$  означает усреднение по первой ЗБ. Усредняются функции, периодические по  $\mathbf{k}$  с периодом обратной решетки.

Для вычисления таких средних используется так называемый метод спецточек, в котором усреднение заменяется суммой с определенными весовыми коэффициентами значений усредняемой функции в нескольких специально выбранных точках ЗБ. Координаты точек среднего значения в единицах  $2\pi/a$  и соответствующие им весовые коэффициенты  $\gamma_i$  для кубической решетки следующие:  $\mathbf{k}_1 = (3/4, 1/4, 1/4)$ ,  $\mathbf{k}_2 = (1/4, 3/4, 1/4)$ ,  $\mathbf{k}_3 = (1/4, 1/4, 3/4)$ ,  $\mathbf{k}_4 = (1/4, 1/4, 1/4)$ .

Итерационный процесс самосогласования сводится к решению уравнения (1) на каждом этапе итераций в нескольких точках среднего значения. Это дает плотность валентных электронов, используемую на следующем этапе итерации для вычисления экранирующего потенциала. Критерием самосогласования служила величина  $\Delta_{\max}$ , которая не должна превышать 1 %.

По вышеприведенной методике был проведен расчет распределения электронной плотности по первой ЗБ. При этом рассматривались три неэквивалентные позиции кислорода (рис. 1) [4]. В частности, позиция I — кислород, общий для октаэдра и додекаэдра; позиция II — кислород, принадлежащий октаэдру; позиция III — кислород, принадлежащий тетраэдру. Естественно, что в каждой из позиций координационное окружение является различным, что и обуславливает различное распределение электронной плотности. Полученное распределение электронной плотности после самосогласования дало возможность определить эффективные ионные радиусы и некоторые другие квантовохимические параметры (табл. 1), а также выявить наиболее вероятные дефектные конфигурации в ГГГ и пути их образования. Вероятность образования дефектного состояния была определена исходя из условия минимальной высоты потенциального барьера, разделяющего положение атома, в регулярном узле решетки и метастабильное положение в межузлии [5].

На рис. 2—4 приведены фрагменты распределения ЭП для различных срезов кристалла, содержащие регулярные узлы (a) и соответствующие вакансии (б).

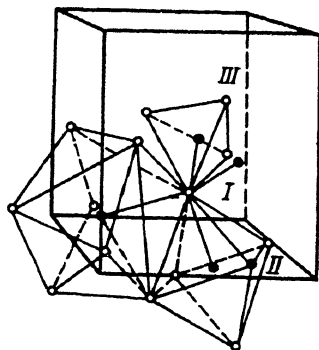


Таблица 1  
Некоторые квантовохимические параметры монокристаллов ГГГ

Вид иона (позиция)	Эффективный ионный радиус, А	Энергия хим. связи, эВ	Пороговая энергия смещения, эВ
O (I)	1.25	33	38
O (II)	1.23	34.3	40.5
O (III)	1.23	34.6	41.2
Ga <sup>3+</sup>	0.81	37.7	56
Gd <sup>3+</sup>	1.31	40.1	65.7
Химическая связь		Степень ионности химической связи	
[Ga—O] <sub>тетр</sub>		0.64	
[Ga—O] <sub>окт</sub>		0.60	
[Gd—O] <sub>окт</sub>		0.77	

Поскольку изобразить все сечения практически невозможно, мы ограничились наиболее характерными. На рис. 2—4, б распределения ЭП приведены в предположении, что межузельный атом смещается настолько далеко (на несколько параметров решетки), что возмущением, вызываемым им, можно пренебречь.

Для определения минимального порога смещения атома необходимо оценить две составляющие: во-первых, энергию химической связи атома, а во-вторых, потенциальную энергию, необходимую для преодоления упругого межатомного взаимодействия. Для оценки второго слагаемого использовалась вариационная процедура выбора наиболее вероятного пути продвижения атома в межузлье. Соответствующие пути смещения атомов в ГГГ схематически представлены на рис. 2—4, а. Сразу же отметим, что учитывался только упругий характер межатомного взаимодействия в пренебрежении ангармоническими поправками.

Высота упомянутого потенциального барьера может характеризовать пороговую энергию смещения атома  $T_d$ , которая является феноменологическим параметром процесса смещения атома при упругом взаимодействии с ним частиц излучения или вторичных частиц [6]. Оцененные таким образом минимальные значения  $T_d$  для атомов, составляющих ГГГ, приведены в табл. 1. Примечательно, что если для атомов кислорода доминирующий вклад в  $T_d$  (до 85 %) вносит

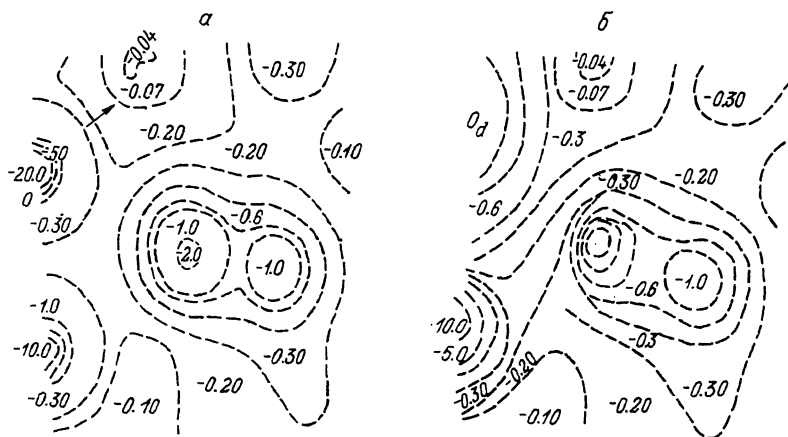


Рис. 2. Распределение электронной плотности атомов кислорода (позиция I) до (а) и после облучения (б).

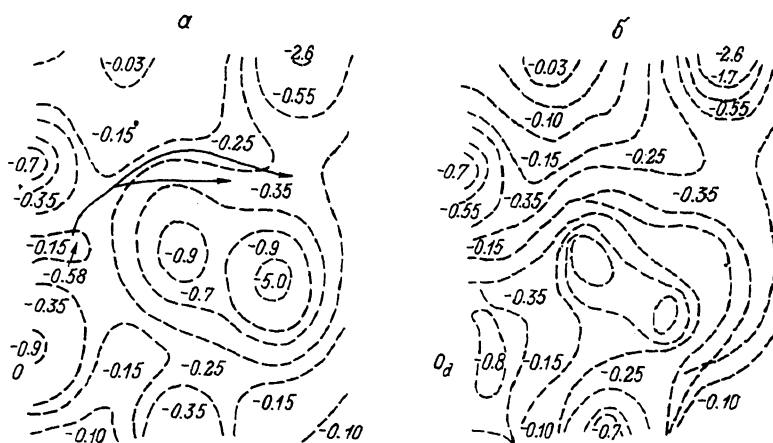


Рис. 3. Распределение электронной плотности атомов кислорода (позиция II) до (а) и после облучения (б).

энергия химической связи, то для более тяжелых атомов этот вклад уменьшается до 60 % (табл. 1).

Полученные значения  $T_d$  позволяют провести оценку концентраций дефектов соответствующих конфигураций, образованных в ГГГ упругим смещением атомов при облучении кристалла различными видами излучений. Такие оценки ранее проводились в [7] для различных значений  $T_d$  в интервале 20—100 эВ, поскольку данные о величинах  $T_d$  в ГГГ отсутствовали. Однако при этом дефектообразование в подрешетках атомов разного сорта рассматривалось независимо, что допустимо лишь при облучении, которое не вызывает разветвленных каскадов атом-атомных столкновений. При каскадообразующем излучении (например, нейтронном) необходимо учитывать столкновение атомов различного сорта, имеющих как различные массы, так и различные значения.

Общую концентрацию смещений в подрешетке атомов сорта  $j$  по аналогии с [7] можно выразить формулой

$$n_d = \int_{T_d}^{T_m} \Phi \frac{\partial \sigma}{\partial T} n \nu_1(T_1) dT_1, \quad (30)$$

где  $\Phi$  — флюенс частиц излучения;  $n$  — концентрация атомов в кристалле;  $\partial \sigma / \partial T$  — дифференциальное сечение процесса смещения первично выбитого атома (ПВА) сорта;  $T_1$  — энергия отдачи ПВА;  $T_m$  — максимально возможная энергия отдачи ПВА;  $\nu_1(T_1)$  — число смещенных атомов сорта  $j$  на один ПВА сорта  $j$  с энергией  $T_1$ . Предполагается, что атом отдачи с энергией  $T < T_d$  не смещается вовсе, а при энергии  $T > T_d$  смещается с вероятностью 1. Тогда дифференциальное сечение процесса смещения равно дифференциальному сечению процесса передачи атому энергии в пределах от  $T_d$  до  $T_m$ . В случае облучения электронами происходит резерфордовское рассеяние их в кулоновском поле ядра, для которого в релятивистском случае выражение  $\partial \sigma / \partial T$  дается формулой Мак-Кинли—Фешбаха [6]. Рассеяние нейтронов обычно описывают как рассеяние твердых сфер [6], что и определяет соответствующее выражение для  $\partial \sigma / \partial T$  в этом случае.

Для расчета каскадных функций  $\nu_1(T_1)$  было применено статистическое машинное моделирование каскада атомных столкновений в трехатомном соединении. Для построения модели каскада сделаны исходные предположения, аналогичные предположениям в модели Кинчина—Пиза [6]. Именно все соуда-



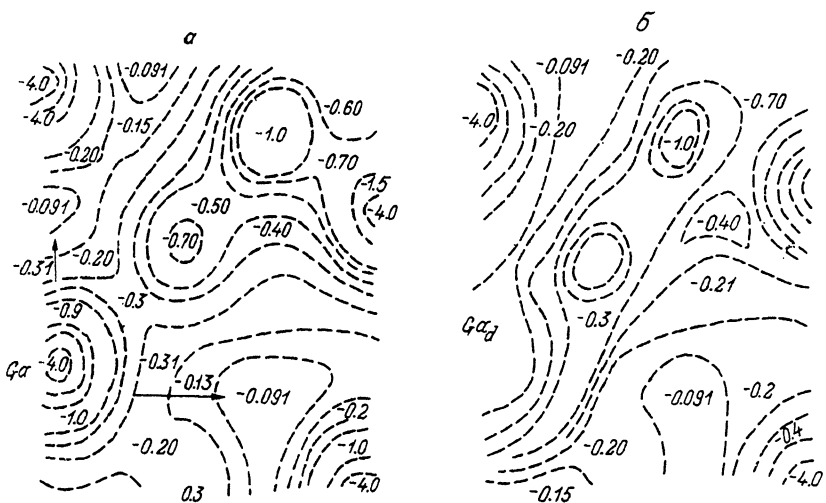


Рис. 4. Распределение электронной плотности атомов галлия (в октаэдрических позициях) до (а) и после облучения (б).

рения атомов парные, не зависят друг от друга и происходят как соударения твердых сфер; все соударения исключительно упругие при  $T < T_u$ , а при  $T > T_u$  энергия тратится только на ионизацию ( $T_u \approx A$ , кэВ, где  $A$  — атомная масса атома [7]); энергия налетающего атома делится между ним и атомом, с которым он столкнулся, так, что суммарная кинетическая энергия атомов после столкновения равна энергии, которую имел налетающий атом до соударения. Предполагалось также, что каждый ПВА обязательно столкнется с одним из атомов, составляющих решетку ГГГ, однако сама кристаллическая структура не учитывалась. В рамках принятых предположений моделировалось случайное развитие каскада атомных смещений в ГГГ. Следя за потерями энергии ПВА, а затем сопровождая все выбитые атомы до остановки, подсчитывали их количество в каждой подрешетке, а для получения статистической оценки каскад провоцировался большое число раз (от 500 до 5000 в зависимости от энергии ПВА). Таким образом были получены каскадные функции  $\nu_1(T_1)$  для всех атомов в ГГГ и соответственно рассчитаны концентрации различных дефектных конфигураций, возникающих в ГГГ при облучении высокоэнергетическими электронами и нейтронами (табл. 2).

Полученные результаты качественно согласуются с данными по оптическому поглощению под воздействием жесткого облучения [7]. В то же время установление более строгих количественных корреляций между дополнительным оптическим поглощением и полученной количественной зонной схемой будет предметом отдельной работы.

Таблица 2

Концентрация дефектов смещения  $n_d$  ( $\text{см}^{-3}$ ) в подрешетках ГГГ, облученном единичным флюенсом ( $1 \text{ см}^{-2}$ ) электронов и нейтронов

Вид излучения	Энергия, МэВ	$n_d$ в подрешетке		
		Gd	Ga	O
Электроны	1.25	0.0006	0.0992	0.493
	3.5	0.416	0.577	0.779
Нейтроны	2	2.15	2.67	9.24

Список литературы

- [1] Bachelet G. B., Namann D. R., Schlüter M. // Phys. Rev. 1982. V. 26B. N 8. P. 4198—4224.
- [2] Довгий Я. О., Заморский М. К., Китык И. В., Колянько Н. И., Сиротюк С. И. // Препринт ИТФ АН УССР. Киев, 1989. ИТФ-89-19Р. 36 с.
- [3] Матковский А. О., Сугак Д. Ю., Улманис У. А., Савицкий В. Г. Центры окраски в редкоземельных галлиевых гранатах. Рига, Инс-т физики АН Латв. ССР, 1987. ЛАФИ-121. 42 с.
- [4] Носенко А. Е., Китык И. В. // УФЖ. 1989. Т. 34. № 3. С. 386—389.
- [5] Довгий Я. О., Китык И. В. // УФЖ. 1984. Т. 29. № 7. С. 1092—1093.
- [6] Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир, 1971. 367 с.
- [7] Убизский С. Б., Матковский А. О., Сугак Д. Ю. и др. // Изв. АН Латв. ССР, сер. физ. и техн. наук. 1989. № 6. С. 12—19.

Львовский  
научно-исследовательский институт  
материалов

Поступило в Редакцию  
30 мая 1991 г.  
В окончательной редакции  
28 июля 1991 г.