

Уменьшение интенсивности ВОГ при  $F > 3$  Мрад (см. рисунок и таблицу) свидетельствует об увеличении степени беспорядка в трансляционном и ориентационном расположении молекул триптофана; в предельном случае аморфной фазы интенсивность ВОГ должна резко уменьшиться вследствие центрорсимметричного характера структуры реализующейся при этом конденсированной фазы вещества.

Таким образом, выполненные исследования зависимости интенсивности и вида спектров ДВЛ и ВОГ в *D*-триптофане от дозы  $\gamma$ -облучения позволяют сделать вывод о сохранении хирально-чистого состояния кристаллов триптофана вплоть до доз  $F = 10$  Мрад. Кроме того, в данной работе обнаружено, что небольшие дозы  $\gamma$ -облучения ( $F = 0 \div 3$  Мрад) приводят к отжигу исходных дефектов кристаллической структуры *D*-триптофана.

В заключение приносим благодарность Р. М. Сардарлы и Л. И. Злобиной за помощь при выполнении данной работы.

#### Список литературы

- [1] Горелик В. С., Злобина Л. И. // Кр. сообщ. по физике. 1988. № 10. С. 23.
- [2] Горелик В. С., Злобина Л. И., Сардарлы Р. М. // Кр. сообщ. по физике. 1990. № 3. С. 33.
- [3] Агальцов А. М., Горелик В. С. // Кр. сообщ. по физике. 1989. № 2. С. 43.

Физический институт  
им. П. Н. Лебедева РАН  
Москва

Поступило в Редакцию  
28 мая 1992 г.

УДК 5. 32

© Физика твердого тела, том 34, № 10, 1992  
Solid State Physics, vol 34, N 10, 1992

## ПАРАМЕТРЫ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ *F*-ЦЕНТРА В BeO

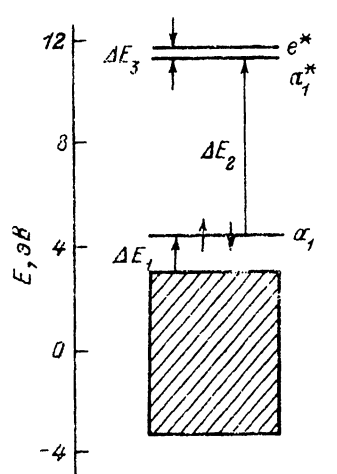
А. Б. Соболев, П. В. Лушников, С. В. Горбунов

Экспериментально установлены отличия *F*-центра в BeO от других ШЗО, заключающиеся в наблюдении дихроизма *F*-полосы поглощения, излучательных переходов из синглетного возбужденного состояния и отсутствия фотоконверсии  $F \rightarrow F^+$ . Совокупность этих данных может быть связана с особенностями электронной структуры *F*-центра в кристалле BeO.

В настоящем сообщении представлены результаты расчетов *F*-центра в BeO методом рассеянных волн в модели «внедренного кластера» [1]. Для коррекции приближения функционала локальной плотности (ФЛП) на самовзаимодействие использовалась полуэмпирическая схема добавок в потенциал межсферной области кластера, связанная с процедурой подгонки ширины запрещенной зоны идеального кристалла под экспериментальное значение [2].

Электронная структура идеального кристалла BeO моделировалась кластером  $[\text{Be}_5\text{O}_{13}]^{16-}$ , а в случае *F*-центра рассматривался аналогичный кластер с удаленным центральным кислородным атомом и измененным числом электронов в кластере. Кластер имел симметрию  $C_{3v}$ , и приведенные далее одноэлектронные состояния классифицировались по неприводимым представлениям данной точечной группы.

Расчет фрагмента идеального кристалла BeO показал, что валентная зона образована гибридованными  $O2p$ -состояниями. В качестве энергетической щели  $E_g$  кристалла принимается зазор между последним заполненным и первым ва-



Одноэлектронный спектр  $F$ -центра в  $\text{BeO}$ .

кантными состояниями. Анализ зависимости величины  $E_g$  от добавки в потенциал межсферной области кластера  $\Delta$  показал, что экспериментальное значение  $E_g$  достигается при  $\Delta \sim 1.1 \text{ Ry}$ . Данная поправка дает результат, аналогичный процедуре коррекции на самовзаимодействие (SiC), в частности сужение зоны валентных состояний и сильную локализацию волновых функций, соответствующих состояниям в валентной зоне.

Расчет электронной структуры кластера  $[V + 2e\text{Be}_5\text{O}_{12}]^{16-}$ , моделирующего  $F$ -центр в кристалле, проводился при фиксированном значении потенциальной добавки ( $\Delta = 1.1 \text{ Ry}$ ). Качественная схема электронных состояний кластерного расчета приведена на рисунке, а в таблице произведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными [3,4]. Как следует из полученного одноэлектронного спектра, оптическое поглощение  $F$ -центра в  $\text{BeO}$  обусловлено переходами из основного состояния  $a_1$  на возбужденные  $a_1^*$ - и  $e^*$ -состояния в соответствии

с поляризационными измерениями [3,4]. Основное состояние  $a_1$  имеет  $s$ -характер и локализовано преимущественно на вакансии ( $\sim 50\%$ ). Состояния  $a_1^*$  и  $e^*$ , имеющие преобладающий  $p$ -характер ( $\sim 20\%$ ) относительно позиции вакансии, имеют существенный вклад межсферной области ( $\sim 50\%$ ), в силу чего значительно делокализованы. Однако экспериментальная величина расщепления возбужденного состояния  $\Delta E_3$ , равная  $0.25 \text{ эВ}$ , существенно превышает расчетную. Причина этого может заключаться в неучете анизотропных вкладов в кластерный одноэлектронный потенциал (не «muffin-tin» эффекты).

В то же время расчетное значение энергии поглощения  $F$ -центра в  $\text{BeO}$  несколько превышает экспериментальное значение (см. таблицу). Этот факт представляется достаточно неожиданным, так как в расчетах  $F$ -центра в  $\text{MgO}$  методом функций Грина (ФГ) в ФЛП приближении с SiC поправкой полученные значения энергии поглощения ниже экспериментального значения [5]. Повидимому, некорректное значение этого параметра связано с взаимным влиянием принятой схемы корректировки ФЛП на SiC и неучета эффектов возможной релаксации ионов ближайшего окружения дефекта. Причем, видимо, влияние первого фактора является преобладающим.

Полученная величина зазора между потолком валентной зоны и основным состоянием дефекта  $a_1$  в  $F$ -центре  $\Delta E_1$  в  $\text{BeO}$  составляет  $1 \text{ эВ}$ . Соответствующее значение в кристалле  $\text{MgO}$  в рамках подобной схемы внедрения без учета SiC поправок составляет  $3.5 \text{ эВ}$  [6]. Значение, полученное методом ФГ для  $F$ -центра в  $\text{MgO}$  [5] с учетом вариации способов корректировки ФЛП приближения, колеблется в диапазоне  $3\text{—}4 \text{ эВ}$ . Такое сопоставление позволяет характеризовать

Основные параметры электронного строения  $F$ -центра в  $\text{BeO}$  (в эВ)

Переход	Расчет	Эксперимент [3,4]
$\Delta E_1$	1.319	—
$\Delta E_2$	7.328	6.30
$\Delta E_3$	0.030	0.25

Примечание.  $\Delta E_1$  — энергетический зазор между потолком валентной зоны и основным состоянием  $a_1$   $F$ -центра,  $\Delta E_2$  — энергия поглощения  $F$ -центра,  $\Delta E_3$  — энергия расщепления возбужденного состояния.

$F$ -центр в  $\text{BeO}$  по сравнению с  $\text{MgO}$  как более глубокий донорный центр. Параметры волновой функции основного состояния указывают на более локализованный характер волновой функции  $a_1$ -состояния  $F$ -центра по сравнению с  $\text{MgO}$  [7].

Полученные результаты коррелируют с данными работы [8], в которой утверждается, что основное состояние  $F^+$ -центра более локализовано в  $\text{BeO}$  по сравнению с  $\text{MgO}$ .

#### Список литературы

- [1] Johnson K. H. // Adv. Quant. Chem. 1973. V. 7. P. 143—185.
- [2] Соболев А. В., Лушников П. В., Бикметов И. Ф. и др. // ФТТ. 1991. Т. 32. № 1. С. 144—151.
- [3] Gorbunov S. V., Ivanov V. Y., Kruzhalov A. V. // J. Nucl. Instr. and Meth. 1987. V. A261. P. 148—160.
- [4] Gorbunov S. V., Kruzhalov A. V., Springis M. J. // Phys. Stat. Sol. (b). 1987. V. 141. P. 293—301.
- [5] Klein B. M., Pickett W. E., Boyer L. L., Zeller R. // Phys. Rev. B. 1987. V. 5. N 11. P. 5802—5815.
- [6] Соболев А. Б., Лобач В. А., Шульгин Б. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3129—3133.
- [7] Baraff G. A., Schluter M. R. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 1853—1859.
- [8] Du Varney R. C., Garrison A. K., Thorland R. H. // Phys. Rev. 1969. V. 188. P. 657—661.

Политехнический институт  
им. С. М. Кирова  
Екатеринбург

Поступило в Редакцию  
29 октября 1991 г.  
В окончательной редакции  
26 мая 1992 г.

УДК 535.343.2

© Физика твердого тела, том 34, № 10, 1992  
Solid State Physics, vol. 34, N 10, 1992

## ЗАВИСИМОСТЬ ФОРМЫ ЛИНИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ОТ ГЕОМЕТРИИ РАССЕЯНИЯ В $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

А. Х. Арсланбеков, О. В. Мисочко, Е. Я. Шерман

Комбинационное рассеяние света (КР) широко используется в исследованиях высокотемпературной сверхпроводимости [1]. Одной из интересных особенностей спектров КР высокотемпературных сверхпроводников является асимметрия формы пика ряда фотонных линий. Она впервые наблюдалась в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  [2]. В дальнейшем асимметрия линий КР наблюдалась и для соединений системы  $\text{Tl—Ba—Ca—Cu—O}$  [3]. Обычно асимметричный контур линии КР приписывается результату квантовой интерференции электронного континуума и дискретного фононного уровня (эффект Фано).

В настоящей работе мы исследовали форму линий КР в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , соответствующую валентному колебанию мостикового кислорода  $\text{O}_4$  с частотой  $\approx 500 \text{ см}^{-1}$ . Образцы  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  ( $x \approx 0.1$ ) имели температуру сверхпроводящего перехода  $\sim 88 \text{ К}$  с шириной  $\sim 3 \text{ К}$ . Спектры КР снимались на установке «Microdil-28» при комнатной температуре и спектральной ширине щели  $2 \text{ см}^{-1}$  в геометрии рассеяния назад. Из-за двойникованности образца вдоль направлений  $[110]$  и  $[\bar{1}\bar{1}0]$  измерения проводились в смешанной геометрии  $z$  ( $xx + yy$ )  $\bar{z}$  и в геометрии  $y$  ( $zz$ )  $\bar{y}$ .

Спектры КР в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  для  $(xx + yy)$ - и  $zz$ -поляризаций приведены на рис. 1. Видно, что линия КР для поляризации  $(xx + yy)$  асимметрична, т. е. его полуширина с высокочастотной стороны  $\gamma_1$  меньше полуширины с низкочастотной