

УДК 539.374 : 548.4

О ВЗАИМОСВЯЗИ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛОВ LiF С ПЕРЕСЕЧЕНИЕМ ДИСЛОКАЦИЙ

В. А. Закревский, А. А. Кусов

На основе рассмотрения атомной структуры ступенек, возникающих при наклонном и ортогональном пересечении дислокаций в кристаллах типа NaCl, оценивается энергия локального электронного возбуждения E . Показано, что для кристаллов LiF эта энергия примерно на 0.7 эВ выше в случае ортогонального пересечения.

1. Наблюдение люминесценции и электронной эмиссии при пластическом деформировании кристаллов фторидов щелочных элементов в сверхвысоком вакууме, а также фото- и термостимулированной электронной эмиссии предварительно деформированных кристаллов указывает на возникновение в процессе их деформирования электронных возбуждений (электронных и дырочных центров) [1, 2]. Выявлена связь эмиссионных явлений с эволюцией дислокационной структуры [1, 3] и показано, что достаточным условием для возникновения деформационной люминесценции (ДЛ) и деформационной эмиссии (ДЭ) является пересечение дислокаций в наклонных плоскостях скольжения [1]. Известно, что пластическое деформирование щелочно-галогенидных кристаллов осуществляется в основном за счет скольжения в ортогональных системах скольжения [4]. Движение же дислокаций в наклонных системах затруднено. В свете этого наблюдавшееся на опыте резкое различие в эмиссионных свойствах отдельных образцов (невоспроизводимость результатов от образца к образцу, а именно отличие в интенсивности ДЛ и ДЭ, наличие образцов, у которых ДЛ и ДЭ начинались не сразу после начала стадии упрочнения или носили характер отдельных всплесков) можно рассматривать как указание на то, что при пересечении дислокаций ортогональных систем скольжения образования электронных возбуждений не происходит. Для эффективного возникновения электронных и дырочных центров необходимым и достаточным условием является, по-видимому, пересечение дислокаций наклонных систем скольжения [5].

В настоящем сообщении сделана попытка физически обосновать этот вывод путем оценки энергии образования электронных возбуждений вблизи ступеньки на дислокации, образовавшейся в результате пересечения с другой дислокацией. Эта оценка выполнена с учетом атомной структуры ядер дислокаций, на которых образуется перегиб при пересечении в ортогональных и наклонных плоскостях скольжения в рамках модели «переноса электрона» Хильша и Поля [6]. В соответствии с [6] предполагается, что для электронных возбуждений важно пересечение дислокаций с образованием ступеньки, а не петли (по механизму Орована), поскольку в первом случае ядра дислокаций при сближении на малые расстояния перестраиваются (иногда даже с образованием эффективного заряда), что приводит к сильному локальному изменению электронной структуры.

2. Для того чтобы проанализировать возможность возникновения электронных возбуждений при пересечении дислокаций, сравним структуру их ядер до и после пересечения как в случае ортогонального, так и наклонного пересечений. Наиболее подробно геометрия заряженных дислокаций, включая их ступеньки и перегибы, исследована в [7], для структур типа NaCl. Показано, что пересечение дислокаций в ортогональных системах скольжения дает атомные конфигурации ступенек и перегибов, качественно отличные от конфигураций при наклонном пересечении. В случае пересечения дислокаций ортогональных систем скольжения, согласно [7], возможны два варианта.

а) Пересечение винтовой дислокации с вектором Бюргера $b^1 = a/2 \cdot [1\bar{1}0]$ (a — постоянная решетки) с плоскостью скольжения, характеризуемой нормалью $n^1 = 1/\sqrt{2} \cdot [110]$ с краевой дислокацией с вектором Бюргера $b^2 = a/2 \cdot [110]$, лежащей в плоскости скольжения с нормалью

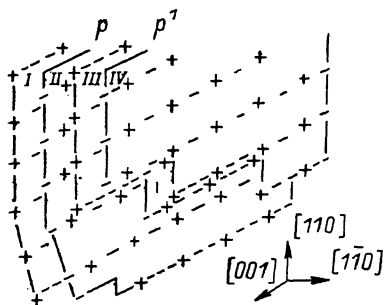


Рис. 1. Атомная структура ступенек при ортогональном пересечении дислокаций [7].

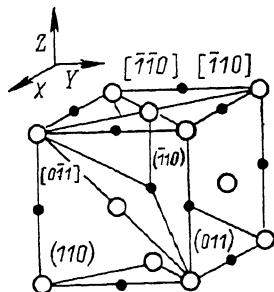


Рис. 2. Геометрия скольжения в структуре NaCl.

$n^2 = 1/\sqrt{2} \cdot [1\bar{1}0]$. В результате пересечения обе дислокации приобретают нейтральные ступеньки высотой $a\sqrt{2}/2$. Эти ступеньки могут двигаться консервативно вместе с дислокацией (рис. 1). На рис. 2 изображена геометрия скольжения в структуре типа NaCl.

б) Пересечение винтовой дислокации с вектором Бюргера $b^1 = a/2 \cdot [1\bar{1}0]$ и нормалью к плоскости скольжения $n^1 = 1/\sqrt{2} \cdot [110]$ с винтовой же дислокацией $b^2 = a/2 \cdot [110]$ и $n^2 = 1/\sqrt{2} \cdot [110]$. Опять обе дислокации после пересечения приобретают нейтральные ступеньки высотой $a\sqrt{2}/2$, совершающие в отличие от первого случая уже не консервативное скольжение.

Рассмотрим случай наклонного пересечения, имея в виду, что одна из дислокаций краевая, образованная обрывом двух соседних экстраполуплоскостей p и p^1 (рис. 1). Тогда, согласно [7], после пересечения образуется полуступенька, соответствующая ступеньке на одной из экстраполуплоскостей. Видно, что, несмотря на то что ступенька на ней имеет высоту $a\sqrt{2}/2$, высота полной ступеньки на двух экстраполуплоскостях будет в два раза меньше $a\sqrt{2}/4$. Заметим, что при этом «рвется» одна связь на атоме, лежащем в ядре дислокации. Этот «обрыв» приводит к возникновению эффективного заряда $\pm e$, где e — заряд электрона [8]. Под термином «обрыв» связи мы будем понимать уменьшение числа атомов в первой координационной сфере данного атома на единицу.

Суммируя эти результаты, можно сказать, что есть существенная разница в конфигурации атомов ступенек при наклонном и ортогональном пересечении дислокаций.

3. Оценим энергию образования E электронного возбуждения вблизи ступеньки на краевой дислокации в случае как наклонного E_1 , так и ортогонального E_2 пересечений. Мы проведем этот расчет в рамках простейшей модели «переноса электрона» [8, 9] с аниона 1 (рис. 3), лежащего в ядре дислокации, на катион 2, относящийся к ближайшему окружению

ядра. Выбор именно такой пары ионов, как показал расчет, требует наименьшей энергии E . Согласно модели «переноса электрона», энергия описывается формулой

$$E_{1,2} = W_{1,2}^1 + W_{1,2}^2 + E_a - I + \Omega, \quad (1)$$

где E_a — энергия сродства электрона к атому галоида (F); I — потенциал ионизации атома щелочного металла (Li); Ω — энергия, необходимая для переноса нейтральных атомов 1 и 2 из бесконечности на места соответствующих ионов; $W_{1,2}^1, 2$ — электростатическая энергия ионов 1 и 2 в случае полуступеньки и полной ступеньки. Эти энергии можно оценить в пренебрежении поляризационными эффектами следующим образом:

$$W_1^1 + W_1^2 = \frac{\alpha_m e^2}{a_0} - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{e^2}{a_0} - F + f_{2,1}(a_0), \quad (2)$$

$$W_2^1 + W_2^2 = \frac{\alpha_m e^2}{a_0} - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{e^2}{a_0} - F + f_{2,1}(a_0) + f_{1,4}(a_0) - f_{2,4}(\sqrt{2} a_0). \quad (3)$$

Здесь $\alpha_m = 1.74$ — постоянная Маделунга; $a_0 = a/2 = 2.07$ А, a — меж-атомное расстояние в LiF . Член в круглых скобках в правой части (2),

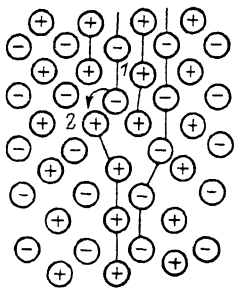


Рис. 3. Атомная конфигурация вблизи ступеньки на краевой дислокации.

расстояний в ядре дислокации). Члены в правой части (2), (3) определяются выражениями

$$F = \frac{e^2}{a_0} \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right] = \frac{e^2}{a_0} \ln 2, \quad (4)$$

$$f_{2,1}(a_0) = \frac{e^2}{a_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{1+n^2}} \approx 0.34 \frac{e^2}{a_0}, \quad (5)$$

$$f_{2,4}(\sqrt{2} a_0) = \frac{e^2}{a_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{2+n^2}} \approx 0.24 \frac{e^2}{a_0}, \quad (6)$$

где при расчете (5), (6) мы ограничились первыми 10 членами ряда, что дает вполне удовлетворительную точность 0.01. Подставив численные значения (4)–(6) и $E_a = 4.1$ эВ, $I = 5.4$ эВ [10] в (2) и (3), а затем (2) и (3) в (1), получим с точностью до малой величины Ω : $E_1 = 6.4$ эВ, $E_2 = 7.1$ эВ. Если сравнить эти энергии с энергией возбуждения в бездефектном кристалле $E = 11$ эВ [6], то видно, что падение энергии при переходе от идеальной решетки к решетке со ступеньками на дислокациях значительно. Примерно половина этого падения возникает за счет исходного ядра дислокации (≈ 2 эВ) и столько же за счет ступеньки на ней. Видно также, что электронное возбуждение имеет меньшую энергию $E_1 < E_2$ в случае именно наклонного пересечения.

Таким образом, в рамках модели «переноса электрона» преимущественное образование электронных возбуждений в случае наклонного пересече-

чения (по сравнению со случаем пересечения в ортогональных плоскостях) становится вполне объяснимым. Для кристаллов с большим межатомным расстоянием (например, RbI) энергия электронного возбуждения вблизи ступеньки при наклонном пересечении еще меньше и может составить 2—3 эВ. Отметим также, что возбуждения возникают в основном в момент пересечения дислокаций, когда искажения решетки еще значительнее, чем рассмотренные в настоящей работе, что может привести к дополнительному понижению энергии образования электронных возбуждений.

Авторы выражают благодарность А. Н. Орлову за полезные обсуждения и замечания.

Л и т е р а т у р а

- [1] *Закревский В. А., Шутьдинер А. В.* Письма в ЖТФ, 1985, т. 10, № 3, с. 139—143.
- [2] *Закревский В. А., Шутьдинер А. В.* ФТТ, 1985, т. 27, № 10, с. 3042—3046.
- [3] *Закревский В. А., Пахотин В. А., Вайткевич С. К.* ФТТ, 1979, т. 21, № 3, с. 723—729.
- [4] *Смирнов Б. И.* Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л.: Наука, 1981. 235 с.
- [5] *Шутьдинер А. В.* Автореф. канд. дис. Л., ФТИ АН СССР, 1986.
- [6] *Нокс Р.* Теория экситонов. М.: Мир, 1966. 219 с.
- [7] *Brantley W. A., Bauer Ch. L.* Phys. St. Sol., 1966, vol. 18, N 1, p. 466—478.
- [8] *Seitz F.* Phys. Rev., 1950, vol. 80, N 2, p. 239—244.
- [9] *Bassani F., Inchauspe N.* Phys. Rev., 1957, vol. 105, N 3, p. 819—822.
- [10] *Кикоин И. К.* Таблицы физических величин. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.

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

Поступило в Редакцию
20 января 1988 г.