

УДК 535.0

AB INITIO ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПРИМЕСНЫХ КРИСТАЛЛОВ. ИОНЫ ХРОМА В ОКСИДНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

Н. А. Кулагин, В. А. Сандуленко

Развивается теория электронных спектров ионов с достраивающейся nl -оболочкой в кристаллах на базе метода самосогласованного поля для кластеров. Выделение примесного кластера из активатора и ионов ближайшего окружения позволяет записать и решить систему самосогласованных уравнений и рассчитать его энергетический спектр. Эффективность метода продемонстрирована на примере ионов хрома в оксидных кристаллах. Показано, что спектры, образующиеся в кристаллах рубина и гранатов с примесью хрома, после радиационного воздействия определяются ионами Cr^{4+} в октаэдрических позициях.

1. Исследованию спектров примесных кристаллов в последние пять лет посвящено огромное число работ. Среди широкого класса активированных кристаллов наибольший научный и практический интерес представляют оксидные соединения с примесью ионов с достраивающейся nl -оболочкой.

Хорошо известно, что оптические, магнитные и ряд других свойств кристаллов, содержащих ионы групп железа ($3d$ -ионы) или лантана ($4f$ -ионы), определяются электронным состоянием последних. В большинстве соединений $3d$ - и $4f$ -ионы могут находиться в состоянии от «+2» до «+5», что затрудняет их идентификацию. Эффективные методы определения числа электронов на nl -оболочке: ЭПР, ЯМР, ЯГР и ряд других не могут охватить все интересные случаи. И тогда при изучении широкозонных кристаллов приходится ограничиться оптическими экспериментами. Вместе с тем возможности эмпирического подхода при получении однозначной информации о валентности примесных ионов весьма ограничены. Более эффективными должны быть теоретические методы.

Наибольшего уровня развития достигла теория кристаллического поля [1], позволяющая в рамках простой точечной модели качественно объяснить наблюдаемые спектры активированных кристаллов. Вместе с тем возможности этого метода невелики.

Наиболее точные результаты при последовательных расчетах электронной структуры кристаллов достигнуты в методах РВ— X_α [2]. Относительная простота метода и ряд эффективных результатов свискали этому методу большое число последователей. Однако *ab initio* теория электронных переходов в примесных кристаллах должна учитывать реальную структуру ближайшего окружения излучающего иона. Конечный результат должен представлять собой систему энергетических уровней кристалла или хотя бы кластера. Решение такой задачи в рамках РВ— X_α метода весьма затруднено.

Более быстрый процесс в решении задачи о расчете электронного спектра кристалла может быть достигнут на базе теории самосогласованного поля для примесных ионов [3, 4]. Рассмотрим основные моменты этой теории и продемонстрируем ее эффективность на примере оксидных кристаллов, активированных ионами хрома.

2. В основе кластерного рассмотрения кристаллов с примесью nl -ионов лежит приближение ионной связи, что позволяет использовать классификацию энергетических уровней активатора по неприводимым представлениям точечной группы ближайшего окружения (исходя из приближения свободного иона).

Эффективность теории кристаллического поля при рассмотрении спектров $3d$ - и $4f$ -ионов в твердых телах подтверждает справедливость такого упрощения.

В рамках ионного приближения мы можем записать волновую функцию кластера из активатора в конфигурации $n_1 l_1^{l_1}$ - и s -ионов ближайшего окружения (координационное число), каждый из которых имеет конфигурацию $n_2 l_2^{l_2}$, в виде

$$\Phi(n_1 l_1^{N_1}, n_2 l_2^{N_2}, \Gamma_i) = A \psi(n_1 l_1^{N_1}, \Gamma) \varphi(n_2 l_2^{N_2}, \Gamma), \quad (1)$$

где $\psi(n_1 l_1^{N_1}, \Gamma)$, $\varphi(n_2 l_2^{N_2}, \Gamma)$ — волновые функции центрального иона и иона лиганда; $\Gamma - \alpha LSM$ — квантовые числа, определяющие состояние ионов в кристалле; оператор \hat{A} обеспечивает антисимметричность волновой функции $\Phi(n_1 l_1^{N_1}, n_2 l_2^{N_2}, \Gamma_i)$ относительно $n_1 l_1 \leftrightarrow n_2 l_2$ перестановок.

Рассматривая только электронные спектры, на первом этапе можно пренебречь электрон-фононным взаимодействием и записать гамильтониан нашей задачи в виде (а. е.)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i, k} \Delta_k^i - \sum_{i, k} \frac{\mathcal{E}_k}{|r_i - R_k|} + \sum_{i < j, k, m} \frac{1}{r_{ij}^{km}}, \quad (2)$$

где первый член отвечает кинетической энергии электронов, второй — потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядрами, последний — межэлектронному взаимодействию. Индексы $\langle ij \rangle$ соответствуют электронам, $\langle km \rangle$ — ядрам.

Для определения энергии кластера обычно используется одноэлектронное приближение при полном разделении переменных [3, 4]. Варьирование выражения для энергии кластера (формула 5.2.17 [4]), относительно радиальных частей одноэлектронных функций $n_1 l_1$ -иона $P(n_1 l_1 | r)$ и лиганда $P(n_2 l_2 | r)$ позволяет получить следующую систему самосогласованных уравнений для функций ионов в твердом теле [3]:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} Y'(nl | r) - \epsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P(nl | r) = X'(nl | r) + \sum_{n' \neq n} \epsilon_{nl, n'l} P(n'l | r), \quad (3)$$

где $Y'(nl | r)$, $X'(nl | r)$ — кулоновский и обменный потенциалы для иона в кристалле, отличающиеся от стандартных функций Хартри—Фока $Y(nl | r)$ и $X(nl | r)$ для свободного иона [5] членами

$$\Delta Y(n_1 l_1 | r_1) = \frac{r_1}{2} \sum_{\substack{k k_1 \\ n_2 l_2}} [\alpha_{i_1 l_2}^{k k_1} Y_{k k_1}(n_1 l_1 n_2 l_2 | r_1) + B_{i_1 l_2}^{k k_1} Y_{k k_1}(n_1 l_1 n_2 l_2 | r_1)],$$

$$\Delta X(n_1 l_1 | r_1) = - \sum_{\substack{k k_1 \\ n_2 l_2}} [\alpha_{i_1 l_2}^{k k_1} Y_{k k_1}(n_1 l_1 n_2 l_2 | r_1) + \beta_{i_1 l_2}^k r_1^k] P(n_2 l_2 | r_1). \quad (4)$$

В выражении для $\Delta Y(n_1 l_1 | r_1)$ и $\Delta X(n_1 l_1 | r_1)$ тензорная функция $Y_{k k_1}(n_1 l_1 n_2 l_2 | r_1)$ получена в [3, 4]. Решение уравнений (3) проводится при определенных граничных условиях.

Анализ системы уравнений (3) показывает, что внедрение иона в кристалл сопровождается существенным перераспределением электронной плотности. Функции $\Delta Y(nl | r)$ и $\Delta X(nl | r)$ имеют те же знаки, что и соответствующие потенциалы Хартри—Фока. Усиление влияния кулоновской и обменной части потенциала для nl -электрона можно трактовать как

эффективное увеличение общего числа электронов парамагнитного иона, т. е. как уменьшение его валентности. Характер и степень перераспределения электронной плотности зависит от значения коэффициентов $a_{l_1 l_2}^{k l_1}$, $b_{l_1 l_2}^{k l_1}$, $\alpha_{l_1 l_2}^{k l_1}$, $\beta_{l_1 l_2}^k$. Выражения для этих коэффициентов весьма громоздки, и в общем виде они приведены в книге [4].

Наибольший интерес для нас представляет зависимость угловых коэффициентов от значения полного орбитального момента примесного атома. Зависимость этих коэффициентов [4, с. 178-180] от симметрии ближайшего окружения примесного иона и энергии штарковского расщепления определяется наряду с коэффициентами $O_{mm'}$ и $O_{mm'}^{\bar{m}\bar{m}'}$ двухцентровыми интегралами $(m_1 m_2 | r_{12}^{-1} | m_1' m_2')$ и $(m_1 | m_2)$. Выражения для этих интегралов достаточно хорошо известны (см., например, [6]).

Решения уравнений (3) наряду с зависимостью от типа и числа лигандов, симметрии кластера зависят от квантовых чисел (αLS), определяющих энергию ^{2s+1}L -состояний. Существенная зависимость энергии уровней от чисел LS была показана для свободных ионов в [4, 7]. Естественно, что для примесных атомов эта зависимость станет более сильной. Определив значения коэффициентов в уравнениях (4) для каждого электронного ^{2s+1}L -состояния и подставив их в систему уравнений (3), мы можем определить радиальные интегралы, зависящие от αLS квантовых чисел, и рассчитать схему уровней примесного кластера.

Этот путь достаточно эффективен, поскольку позволяет достаточно корректно решить спектральную задачу для примесного кристалла, задавая лишь значение межионного расстояния R между примесными ионом и лигандами, симметрию кластера и исходные волновые функции. Точность полученных значений энергии будет определяться корректностью сделанных ранее упрощений, а также приближениями, выбранными при вычислении потенциалов окружения (4), и эффективностью математических методов решения систем интегродифференциальных уравнений второго порядка (3). Для примера рассмотрим ион $\text{Cr}^{3+} (3d^3)$. Средний радиус $3d$ -оболочки $(3d | r | 3d)$ свободного иона хрома по мере возрастания энергии ^{2s+1}L -уровня увеличивается с 1.0794 а. е. для 4F -терма до 1.1111 а. е. для 2D -терма. Интеграл Рака B изменяется от 1176.5 до 1136.9 с^{-1} , а интеграл C — от 4409.4 до 4239.7 см^{-1} . Для иона в кластере $\text{Cr}^{3+}[\text{O}^{2-}]_6$ $R = 1.96 \text{ \AA}$ средний радиус $3d$ -оболочки увеличивается до 1.135 а. е. основного терма и 1.291 а. е. для 2D -термов. Различие в радиальных интегралах для основного и наиболее возбужденного состояния возрастает в 2.2 раза. Для d^N - и тем более f^N -ионов при таком подходе необходимо проведение большого объема вычислений; d^3 -конфигурация в кубическом поле, например, имеет 11 энергетических уровней. Для f^3 -конфигурации в поле с симметрией C_{3v} число штарковских компонент уже более 100. И в большинстве случаев более целесообразно определить энергию уровней в рамках так называемой параметризационной схемы.

3. Известно, что энергия $^{2s+1}L_J$ -электронных состояний свободного иона с nl^N -конфигурацией в первом приближении определяется заданием l -радиальных интегралов Слэтера $F_k(nl, nl)$ (интегралов Рака B, C для d -ионов, $E_i(nf, nf)$, $i=1, 2, 3$ для f -ионов) и константы спин-орбитального взаимодействия $\eta(nl)$ [5]

$$F_k(nl, nl) = \int_0^\infty \int_0^\infty P^2(nl | r) \frac{r^k}{r^{k+1}} P^2(nl | r') | dr dr',$$

$$\eta(nl) = \int_0^\infty P^2(nl | r) r^{-3} dr, \quad C = \frac{5}{63} F_4(3d, 3d),$$

$$B = \frac{1}{441} [9F_2(3d, 3d) - 5F_4(3d, 3d)]. \quad (5)$$

Для примесного иона в простейшем варианте теории к $(l+1)$ параметрам свободного иона добавляются параметры кристаллического поля B_{kq} .

В случае d -иона в кубическом поле имеется только один дополнительный параметр Dq . Использование небольшого числа параметров не позволяет описать спектр с высокой точностью. Тем не менее это приближение можно использовать как исходное для дальнейших вычислений.

Для определения теоретических значений $F_k(nl, nl_2)$ и $\eta(nl)$ иона в кристалле нам достаточно рассчитать систему уравнений (3) для центра тяжести nl^N -конфигурации (проводя усреднение потенциала для лигандов по сфере радиуса R или решая уравнения для основного состояния). При этом, как показали данные численных расчетов, мы получаем результаты, хорошо соответствующие экспериментам [3, 4].

Перейдем к рассмотрению методов определения параметров B_{kq} . Если речь идет об ионе с идентифицированным оптическим спектром, как например Cr^{3+} в рубине или гранате, то мы можем использовать полуэмпирические значения Dq или B_{kq} . Для иона с неизвестным спектром, скажем ионы Cr^{2+} или Cr^{4+} в оксидных соединениях, для определения значений параметров кристаллического поля (ПКП) можно использовать следующую схему расчета, предложенную в работе [8].

Искомое значение B_{kq} для иона с nl^N -конфигурацией мы можем найти по формуле

$$B_{kq} = \alpha_k B_{kq}^{\text{реп}}, \quad (6)$$

где $B_{kq}^{\text{реп}}$ — реперное значение ПКП, соответствующее иону в данной электронной конфигурации в данном (подобном) кристалле. Выражение для α_k имеет вид

$$\alpha_k = \frac{(nl | r^k | nl)}{(nl | r^k | nl)_{\text{реп}}} \frac{R_{\text{реп}}^{k+1}}{R^{k+1}}, \quad (7)$$

где $(nl | r^k | nl)$ и $(nl | r^k | nl)_{\text{реп}}$ — теоретические средние значения k -й степени радиуса nl -оболочки искомого и реперного ионов. Первый множитель учитывает перераспределение электронной плотности при замещении ионов и дает основной вклад в α_k . Второй множитель в (7) описывает изменение межионного расстояния, вызванного различием в ионных радиусах ионов.

Предложенную схему мы используем ниже для рассмотрения спектров примесных ионов хрома в оксидных кристаллах.

4. Оптические спектры ионов хрома в рубине и гранате хорошо известны. Ионы Cr^{3+} ($3d^3$ -конфигурация) находятся в окружении 6 ионов O^{2-} в октаэдрической позиции. Полуэмпирические значения B , C , η ($3d$), Dq для Cr^{3+} в ряду оксидных монокристаллов $\alpha-Al_2O_3$, $Y_3Al_5O_{12}$, $Gd_3Sc_5O_{12}$, $Gd_3Sc_2Ga_3O_{12}$ приведены в табл. 1.

В рамках нашей модели Cr^{3+} : $[O^{2-}]_6$ кластеры в рассмотренных соединениях в первом приближении отличаются только радиусом координационной сферы. Истинные значения межионных расстояний $Cr-O$ нам неизвестны, и в качестве первого шага теоретические значения B , C и η ($3d$) мы можем найти, решая уравнения (3) при разных значениях радиуса координационной сферы.

Таблица 1

Полуэмпирические значения параметров B , C , Dq для иона Cr^{3+} в кристаллах ($см^{-1}$)

	$\alpha-Al_2O_3$	$Y_3Al_5O_{12}$	$Gd_3Sc_5O_{12}$	$Gd_3Sc_2Ga_3O_{12}$
B	682	725	740	740
C	3120	3373	3578	3578
Dq	1787	1650	1500	1500

Таблица 2

Теоретические значения радиальных интегралов для ионов хрома в кластере $\text{Cr}^{3+} : [\text{O}^{2-}]_6$ при различных $R_{\text{Cr-O}}$ (см^{-1})

Интеграл	Свободный ион	$R, \text{Å}$			
		2.0	1.96	1.9	1.8
B	1158	826	789	689	621
C	4332	2936	2829	2451	2206
η (3d)	291	229	220	195	168

В используемых программах решения систем уравнений (3), которые подробно описаны в [4], в качестве исходных выбраны функции для свободных ионов хрома (полученные нами при решении уравнений Хартри—Фока по программе [9]) и кислорода O^{2-} (функции Рутаана [10]). Уравнения (3) решались только для ионов Cr^{3+} , поскольку следующий шаг самосогласования не приводит к качественному изменению результатов. Значения параметров B , C и η (3d) при различных R приведены в табл. 2. Результаты расчетов свидетельствуют о качественно правильном описании экспериментальных явлений в рамках предложенной схемы. При переходе свободного иона в кристалл происходит уменьшение значений параметров B , C и η (3d), которые уменьшаются с уменьшением межионных расстояний в кристаллах. Объясняется изменение спектров ионов при переходе от фторидов к оксидам и хлоридам [4], при воздействии внешнего гидростатического давления [11].

С другой стороны, завышенные более чем на 20 % значения интегралов для свободных ионов наряду с отличием от полумпирического отношения B/C не позволяют получить требуемой точности при определении энергии уровней примесного иона.

Сравнение данных табл. 1 и 2 показывает, что хорошее согласие для рубина достигается при R , близком к 1.9 Å , для алюмоиттриевого граната (АИГ) при $R=1.92 \text{ Å}$, для гадолиний-скандиевого и гадолиний-скандий-галлиевого при $R=1.94 \text{ Å}$, что находится в хорошем согласии с экспериментом. Используя полумпирические значения Dq , можно легко рассчитать теоретические схемы уровней ионов Cr^{3+} в этих кристаллах.

5. Перейдем к рассмотрению спектров ионов Cr^{4+} и Cr^{2+} в оксидных кристаллах.

γ -облучение кристаллов рубина и гранатов с определенной долей окиси хрома приводит к образованию спектров наведенного поглощения (НП) [8, 12] с максимумами полос 217, 270, 360 и 460 нм для рубина и 253, 282, 417 и 488 нм у АИГ. Подобные спектры дополнительного поглощения (ДП) проявляются после отжига этих кристаллов, активированных также ионами двухвалентных металлов (Ca^{2+} , Mg^{2+}), в окислительной атмосфере [13, 14].

В ранних работах по исследованию радиационных дефектов в кристаллах рубина спектр НП объяснялся образованием ионов Cr^{2+} и Cr^{4+} в приблизительно равной концентрации [15]. С другой стороны, в теоретической работе [16] сделан вывод, что указанный спектр не принадлежит ионам Cr^{2+} и Cr^{4+} . В [8, 17] изменение валентности ионов хрома зафиксировано по смещению рентгеновских K_{α} -линий после γ -облучения рубина дозами 10^2 — 10^4 Гр. В экспериментах наблюдалось смещение $\text{Cr}K_{\alpha}$ -линий в область меньших энергий, что однозначно свидетельствует об образовании в основном ионов Cr^{4+} , что было подтверждено также данными метода АПР [13]. Подобная картина образования НП наблюдается и в кристаллах алюмоиттриевого граната с примесью хрома [12].

Экспериментальные данные по образованию спектров НП позволяют предположить существование одного механизма образования НП или ДП для кристаллов рубина и гранатов. Вид спектра НП (ДП) практически

не зависит от внешних факторов, т. е. определяется только наличием ионов хрома в определенной концентрации (обычно не больше 0.1—0.3 вес. %).

Для идентификации спектра НП проведем расчет спектра ионов Cr^{2+} и Cr^{4+} . Будем исходить из предположения, что γ -облучение кристаллов не приводит к смещению ионов хрома из октаэдрических узлов.

Для расчета спектров ионов Cr^{n+} в кластере $\text{Cr}^{n+} : [\text{O}^{2-}]_6$ используем развитую выше методику. Данные вычислений интегралов B , C и η ($3d$) при различных межионных расстояниях приведены в табл. 3. Значение Dq определим по формуле (7), выбрав в качестве реперного ионы V^{3+} ($3d^2$), и Mn^{3+} ($3d^4$) в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3 : \text{V}^{3+}$ $Dq=1900 \text{ см}^{-1}$. При $R=1.9 \text{ \AA}$ получаем следующие значения параметров (см^{-1}): $Dq=2250$, $B=1030$, $C=3873$. При $R=1.92 \text{ \AA}$ $Dq=2050$, $B=1080$, $C=3985$. Используя эти данные легко показать (см., например, [4]), что полосы НП 217, 360 и 460 нм (рубин), 253, 417 и 488 нм (АИГ) можно отнести к ${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_2$, ${}^3T_1 \rightarrow {}^3T_2$ электронным переходам в ионах Cr^{4+} .

Таблица 3

Теоретические значения радиальных интегралов для кластеров $\text{Cr}^{n+} : [\text{O}^{2-}]_6$ (см^{-1})

Ион	$R, \text{ \AA}$	B	C	$\eta(3d)$
Cr^{2+}	2.1	654	3101	219.2
Cr^{4+}	1.9	1031	3873	289.8

Предложенная схема расчета энергии штарковского расщепления достаточно проста и может показаться только грубым приближением. Расчеты показывают, что формула (6) позволяет получать результаты, достаточно близкие к экспериментальным. Это и понятно, поскольку мы используем реперные полуэмпирические значения Dq , которые для изо-

электронных серий изменяются в небольших пределах. Вопрос об учете тригонального искажения в кластерах $\text{Cr}^{4+} : [\text{O}^{2-}]_6$ пока является открытым. Вместе с тем кубическое приближение позволяет рассмотреть качественную картину спектров НП активированных кристаллов.

Остается открытым вопрос и об идентификации последней полосы поглощения в кристаллах с ионами хрома: 260 (рубин), 282 (АИГ) и 290 нм (ГСГ, ГСП). Иону Cr^{2+} (конфигурация $3d^4$) в октаэдре [4] должна соответствовать широкая достаточно интенсивная линия в области 700 нм, которая соответствует ${}^5E \rightarrow {}^5A$ переходу. Следовательно, НП (ДП) кристаллов не связано с образованием ионов Cr^{2+} . Наличие в спектрах НП (ДП) пока еще не идентифицированной полосы, интенсивность которой синхронно меняется с другими линиями, можно объяснить понижением локальной симметрии, переносом заряда и интеркомбинационными переходами ${}^3A_2 \rightarrow {}^1A_2$, 1T_2 . Согласно расчетам, полосы поглощения последних в рубине лежат в области 260 нм.

6. Таким образом, мы развили теорию электронных спектров примесных кристаллов на основе кластерного варианта метода самосогласованного поля. Эта теория позволяет рассматривать схемы уровней и энергии переходов ионов в кристаллах, не ограничивая класс соединений и примесей. Предложенная схема может с успехом использоваться при изучении электронных спектров и возбуждений в ионных кристаллах. Единственным эмпирическим параметром при расчетах одноэлектронных функций является межионное расстояние.

Использование развитой теории при анализе спектров оксидных соединений с примесью хрома демонстрирует ее высокую эффективность и позволяет объяснить спектр облученных кристаллов рубина и граната переходом части ионов хрома из состояния Cr^{3+} в Cr^{4+} .

Л и т е р а т у р а

- [1] Свиридов Д. Т., Смирнов И. Ф. Теория оптических спектров ионов переходных металлов. М., 1977.
- [2] Слетер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. М., 1978.

- [3] Кулагин Н. А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 7. С. 2039—2044.
- [4] Кулагин Н. А., Свиридов Д. Т. Методы расчета электронных структур свободных и примесных ионов. М., 1986.
- [5] Хартри Д. Расчет атомных структур. М., 1960.
- [6] Дружинин В. В., Москвин А. С. // ФММ. 1968. Т. 26. № 3. С. 415—425.
- [7] Кулагин Н. А. // Опт. и спектр. 1980. Т. 48. № 1. С. 3—9.
- [8] Kulagin N. A., Sviridov D. T. // J. Phys. C.: Sol. St. Phys. (London). 1984. V. 17. N 15. P. 4539—4546.
- [9] Богданович П. О. Программа численного решения уравнений Хартри—Фока. Вильнюс, 1978.
- [10] Clementi E., Roetti C. // Atom Data and Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. N 3—4. P. 177—478.
- [11] Кулагин Н. А., Свиридов Д. Т. // ДАН СССР. 1982. Т. 266. № 3. С. 616—619.
- [12] Кулагин Н. А., Озеров М. Ф., Рохманова В. О. // ЖПС. 1987. Т. 46. № 4. С. 612—616.
- [13] Бессонова Т. С., Ганапольский Е. М., Хаимов-Мальков В. Я. // ЖПС. 1981. Т. 34. № 4. С. 690—699.
- [14] Крутова Л. И., Лукин А. В., Сандуленко В. А. и др. // Опт. и спектр. 1987. Т. 63. № 4. С. 672—676.
- [15] Arkhangelskii G. E., Morgenstern Z. L., Neustroev V. B. // Phys. St. Sol. 1967. V. 22. N 1. P. 289—295.
- [16] Pontnau J., Mankaich, Adde H. // Ch. r. Acad. S. 1976. V. 282. N 1. P. 21—23.
- [17] Залюбовский И. И., Кулагин Н. А., Литвинов Л. А., Подус Л. П. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 3. С. 841—848.

Запорожский государственный университет
Запорожье

Поступило в Редакцию
3 марта 1988 г.
В окончательной редакции
12 сентября 1988 г.