

которые находятся в удовлетворительном согласии с рассчитанными (см. таблицу). В таблице также приведены значения температуры Дебая Θ , шпинелей, рассчитанные методом де Лоней [9], и сжимаемость β , рассчитанная по формуле $\beta = 3/(C_{11} + 2C_{12})$.

Таким образом, метод силовых постоянных позволяет с удовлетворительной точностью рассчитать упругие постоянные таких сложных соединений, как шпинели, даже в приближении ближайших соседей, но с обязательным учетом угловых силовых констант.

Список литературы

- [1] Bruesch P., D'Ambrogio F. // Phys. St. Sol. (b). 1972. V. 50. N 2. P. 513—526.
- [2] Wakamura K., Arai T. A., Orati S. // J. Phys. Soc. Jap. 1973. V. 35. N 5. P. 1430—1436.
- [3] Pandey H. // Phys. St. Sol. 1965. V. 11. N 3. P. 743—751.
- [4] Grimes N. W., Collet A. J. // Phys. St. Sol. (b). 1971. V. 43. N 2. P. 591—599.
- [5] Waldron R. D. // Phys. Rev. 1965. V. 99. N 6. P. 1727—1735.
- [6] Коптев Ю. А., Пентин Г. С. Расчет колебаний молекул. М., 1977. 220 с.
- [7] Смит Я., Вейн Х. Ферриты. М., 1962. 504 с.
- [8] Капитонов А. М., Квашнина О. П., Квашнин Г. М. // Тез. докл. XIV Всес. конф. по физике магнитных явлений. Харьков, 1979. С. 413—414.
- [9] Алерс Дж. Физическая акустика / Под ред. У. Мэсона. Т. IIIБ. Динамика решетки. М., 1968. С. 13—61.

Красноярский политехнический институт
Красноярск

Поступило в Редакцию
11 января 1989 г.
В окончательной редакции
2 июня 1989 г.

УДК 548.4 : 539.219.3

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 11, 1989

СТАБИЛИЗАЦИЯ ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ В КРИСТАЛЛАХ KCl

В. В. Гаверило, А. В. Гектин, В. Я. Серебрянный, А. Н. Варахсин

Образование центров окраски в щелочно-галогидных кристаллах (ЩГК) при стационарном облучении является во многом структурно-чувствительным эффектом [1]. При этом в чистых кристаллах определяющую роль играют не дислокации, а дефекты вакансионного типа [2]. По аналогии с данными о стабилизации H -центров (Cl_2) атомами примеси [3] или примесно-вакансионными диполями [4] можно предположить возможность подобного явления и за счет стабилизирующего действия дивакансий. Для проверки этого предположения методом абсорбционной спектроскопии с временным разрешением (АСВР) [5] исследовалась кинетика затухания F -полосы поглощения в кристаллах KCl (560 нм), наведенной импульсом электронов сильноточного ускорителя ($E_e = 400$ кэВ, 3 нс при 290 К). В качестве объекта исследования использовались номинально чистые кристаллы KCl (суммарное содержание двухвалентных примесей было менее $2 \cdot 10^{-5}$ вес. %). Образцы с избыточной концентрацией дивакансий (C_b , определенная методом контрольного окрашивания, составляла $\sim 10^{17}$ см $^{-3}$) создавались путем кратковременного (3 мин) отжига ($T = 220$ °С) облученных до 1000 Мрад образцов [6].

На рис. 1 показана кинетика затухания F -полосы в исходном (кривая 1) и содержащем 10^{17} см $^{-3}$ дивакансий (кривая 2) кристаллах KCl. В обоих типах образцов часть F -центров разрушается за характерные времена 240 нс, но доля сохраняющихся в обогащенном вакансионными центрами кристалле F -центров в 1.5 раза больше, чем в исходном. Поскольку сравне-

ние проводилось для кристаллов одинакового происхождения, можно предположить, что основную роль в усилении F -окрашиваемости образцов играют присутствующие дивакансии.

Для объяснения этого эффекта предположим, что $F-H$ -пары рождаются случайно относительно дивакансий, а их повышенная «выживаемость» связана со стабилизацией H -центров в результате захвата дивакансиями. Возможность действия такого механизма проверялась путем расчета пространственной зависимости профиля энергии взаимодействия H -центра и дивакансии ($v_a^+ v_c^-$). Равновесные конфигурации некоторых дырочных центров в ЩГК описаны в работе [7]. Используя аналогичный [7, 8] подход, вычисляли энергию связи E_c H -центра и $v_a^+ v_c^-$. Расчеты проводились с помощью программы FORMIG, определяющей методом молекулярной статистики деформацию решетки вокруг дефекта из условий

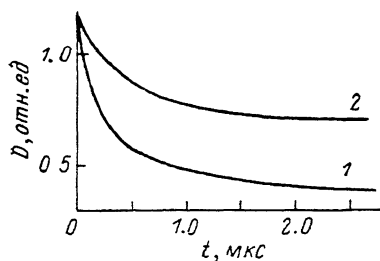


Рис. 1.

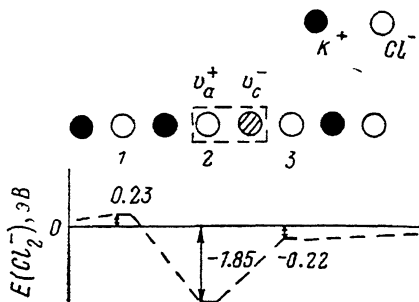


Рис. 2.

достижения минимума E_c . Подробно процедура расчета параметров точечных дефектов описана в [9].

Результаты расчета показаны на рис. 2. Приведенные на схеме значения энергии соответствуют расположениям H -центра в анионных узлах (1—3) кристаллической решетки в окрестности дивакансии. Из полученных результатов следует, что локализация H -центра в дивакансии дает выигрыш в энергии в 1.85 эВ. Дивакансия как ловушка асимметрична при захвате H -центра. В окрестности дивакансии имеется сложный потенциальный рельеф, влияющий на вероятность миграции H -центров. Так, со стороны v_c^- есть условия для безактивационного захвата дырочного центра. В то же время перемещение H -центра вблизи анионного узла дивакансии связано с увеличением энергии системы (на величину до 0.23 эВ), что эквивалентно наличию барьера в потенциальном рельефе и обуславливает запрет на захват H -центра. Следует заметить, что дивакансия с локализованным в ней атомом галоида способна стабилизировать еще один H -центр, т. е. образовать конфигурацию $(Cl_2^0)_{ac}$ (энергетический выигрыш 1.64 эВ), являющуюся основой для V_2 -центра $(Cl_3^0)_{aca}$. Это объясняет факт наблюдения в экспериментах по АСВР полосы поглощения V_2 -центров уже через 10 нс после окончания импульса электронов [10].

Оценим кинетику процесса стабилизации центров окраски в рамках предлагаемого механизма. Такой процесс описывается по теории диффузионно-контролируемых процессов уравнением [11]

$$dC_b/dt = dC_H/dt = -4\pi D r_0 C_b C_H, \quad (1)$$

где C_H — концентрация H -центров; C_b — концентрация центров захвата, роль которых в рамках высказанных предположений играют преимущественно дивакансии; D — коэффициент диффузии H -центров; r_0 — радиус захвата дивакансией H -центров, равный постоянной решетки. Численные параметры для оценки уравнения (1) брались из работы [12]. При условии, что $C_b^0 > C_H^0$ (где C_b^0 , C_H^0 — начальные концентрации дивакансий и H -центров), решение уравнения дает время захвата H -центров

на ловушку $\tau^{-1} = 4\pi D r_0 (C_B^0 - C_H^0)$. В случае $\Delta C \sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $\tau = 100 \text{ нс}$. Т. е. при случайной относительно дивакансий генерации $F-H$ -пар подавление спада концентрации F -центров вследствие действия рассматриваемого механизма проявляется при временах, близких к наблюдаемым в эксперименте.

Таким образом, экспериментальные результаты и теоретические оценки подтверждают возможность стабилизации $F-H$ -пар в ШГК за счет захвата подвижных H -центров на ловушках вакансионного типа. Эффективность механизма растет по мере увеличения концентрации дивакансий, и, как следует из модели накопления центров окраски [13], его вклад весьма существен не только на первой стадии окрашивания, но и на поздних стадиях, когда из-за рекомбинации центров окраски число дивакансий непрерывно повышается.

Список литературы

- [1] Clark C. D., Crowford J. H. // Adv. Phys. 1973. V. 22. N 2. P. 117—206.
- [2] Гектин А. В., Ширан Н. В. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 5. С. 775—779.
- [3] Delbecq C. J., Hutchinson E., Schoemaker D., Yasaitis E. L., Yuster P. H. // Phys. Rev. 1969. V. 187. N 3. P. 1103—1119.
- [4] Hayes W., Nichols G. M. // Phys. Rev. 1960. V. 117. N 4. P. 993—998.
- [5] Алукер Э. Д., Гаврилов В. В., Дейч Р. Г., Чернов С. А. Быстропротекающие процессы в щелочно-галлоидных кристаллах. Рига: Зинатне, 1987. 184 с.
- [6] Гектин А. В., Ширан Н. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1507—1509.
- [7] Catlow C. R. A., Diller K. M., Hobbs L. W. // Phil. Mag. 1980. V. A 42. N 2. P. 123—150.
- [8] Norget M. J. // Harwell report AERE-7650. 1974. 49 p.
- [9] Вараксин А. Н., Колмогоров Ю. Н. // Деп. в ВИНТИ. 1985. № 1878-85.
- [10] Яковлев В. Ю. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 4. С. 1214—1216.
- [11] Waite T. R. // Phys. Rev. 1957. V. 107. N 2. P. 463—470.
- [12] Гаврилов В. В., Дейч Р. Г., Дяченко С. В., Нагли Л. Е., Пирогов Ф. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 1904—1906.
- [13] Гектин А. В., Серебрянный В. Я., Ширан Н. В. // УФЖ. 1988. Т. 33. № 4. С. 590—592.

НПО «Монокристаллреактив»
Харьков

Поступило в Редакцию
25 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
5 июня 1989 г.

УДК 538.975

Физика твердого тела, т. 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

СУПЕРПАРАМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК Pd—Fe

Р. М. Мурзабабаев

Считается, что пленки, изготовленные из упорядоченных магнитных материалов, например железа, в которых обменное взаимодействие происходит между ближайшими в решетке соседями, переходят из трехмерного магнитного состояния в двумерное, если их толщина не больше нескольких десятков ангстрем [1]. Сплавы на основе металлов с обменным усилением, к которым относится Pd—Fe, обладают своеобразными магнитными свойствами. Поэтому подход к ним, основанный на привычных представлениях об упорядоченных магнетиках, иногда оказывается несостоятельным. В настоящей работе с помощью эффекта Мессбауэра показано, что пленки Pd—Fe теряют свойства, присущие массивным магнитным материалам, при значительно больших толщинах.

Пленки Pd—Fe были изготовлены методом катодного распыления из сплава, содержащего 14.4 ат. % Fe.¹ Особенностью данного метода явля-

¹ Эксперимент проводился в университете им. Джона Гопкинса. г. Балтимор, США.