

<https://doi.org/10.3176/phys.math.1974.1.17>

УДК 537.226+537.311.33.01

В. САЛОМАТОВ, Н. КРИСТОФЕЛЬ

## ЛОКАЛЬНЫЕ ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛА KCl С ДВУХВАЛЕНТНЫМ АКТИВАТОРОМ

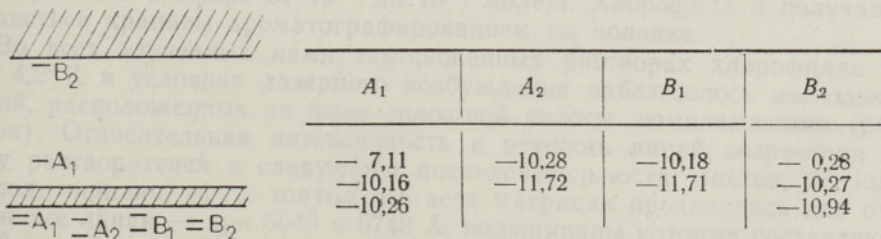
### III. Результаты расчета системы KCl-Sm<sup>2+</sup>

V. SALOMATOV, N. KRISTOFFEL. KANEVALENTSE AKTIVAATORIGA KCl KRISTALLI LOKAAL-  
 SED OHEELEKTROONSED SEISUNDID. III. SÕSTEEMI KCl-Sm<sup>2+</sup> ARVUTUSE TULEMUSED

V. SALOMATOV, N. KRISTOFFEL. LOCALIZED ONE-ELECTRON STATES OF THE KCl CRYSTAL  
 WITH A DIVALENT ACTIVATOR. III. THE RESULTS OF THE CALCULATION FOR THE  
 SYSTEM KCl-Sm<sup>2+</sup>

В [1, 2] для двухзонной модели щелочногалогидного кристалла в схеме МО ЛКАО с использованием метода функций Грина нами была развита теория системы локальных одноэлектронных уровней центра симметрии  $C_{2v}$ , образованного двухвалентной катионной примесью с зарядокомпенсирующей вакансией в ближайшей координационной сфере. Результаты расчета KCl-Eu<sup>2+</sup> [3] позволили уточнить механизмы ряда физических процессов в этом фосфоре [3, 4].

В настоящем сообщении приведены результаты аналогичного расчета для основного состояния центра KCl-Sm<sup>2+</sup>. Параметры возмущения, как и в [3], рассчитывались на основании хартри-фоковских радикальных функций свободного Sm<sup>2+</sup>. Положения локальных одноэлектронных уровней ( $\epsilon\epsilon$ ) приведены в таблице. За начало отсчета принято дно зоны проводимости и указаны неприводимые представления, по которым преобразуются соответствующие одноэлектронные функции. Рисунок иллюстрирует расположение локальных уровней относительно зон основания.



— 4f

Как и предполагалось, система индуцированных локальных уровней KCl-Sm<sup>2+</sup> (4f-уровни KCl-Sm<sup>2+</sup> лежат ниже, чем у KCl-Eu<sup>2+</sup>) качественно такая же, как у KCl-Eu<sup>2+</sup>. Положения большинства уровней и количественно различаются незначительно. Исключение составляет уро-

вень  $B_2$  ( $E = -0,28$  эв), который расположен заметно ближе к зоне проводимости. Вследствие этого можно ожидать сдвига максимума спектра фотопроводимости в KCl-Sm<sup>2+</sup> в коротковолновую сторону по сравнению с KCl-Eu<sup>2+</sup>. Уровни под валентной зоной слегка смещены вниз вследствие уменьшения (увеличения по абсолютной величине отрицательных параметров) индуцирующих параметров при замене Eu<sup>2+</sup> → Sm<sup>2+</sup>. Положение дырочного A<sub>1</sub>-уровня, определяемое в основном «смешивающими» параметрами, изменяется при этом незначительно. В той мере, в какой кинетические процессы в фосфоре определяются спектром локальных уровней в данной энергетической области, следует ожидать аналогий в свойствах KCl-Eu<sup>2+</sup> и KCl-Sm<sup>2+</sup>. В частности, в KCl-Sm<sup>2+</sup> следует ожидать захвата дырки в области центра без ионизации активатора.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Кристофель Н., Саломатов В., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 21, 245 (1972).
2. Саломатов В. Н., Кристофель Н. Н., Препринт FAI-14, Тарту, 1972.
3. Саломатов В., Кристофель Н., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 21, 387 (1972).
4. Парфианович И. А., Мецик В. М., Саломатов В. Н., Шуралева Е. И., Опт. и спектр., 35, 876 (1973).

Научно-исследовательский институт  
прикладной физики при Иркутском  
государственном университете

Поступила в редакцию  
8/X 1973

Институт физики  
Академии наук Эстонской ССР

В	В	А	А
10,2	10,18	10,2	11,7
10,27	11,7	11,7	10,18
10,24			10,2

Как и предполагалось, система индуцированных локальных уровней KCl-Sm<sup>2+</sup> (4)-уровня KCl-Sm<sup>2+</sup> лежит ниже, чем у KCl-Eu<sup>2+</sup> (4) и KCl-Eu<sup>2+</sup> (3). Положение большинства уровней в KCl-Sm<sup>2+</sup> относительно уровней KCl-Eu<sup>2+</sup> (4) и KCl-Eu<sup>2+</sup> (3) различно. Следовательно, различия в свойствах