

Н. КРИСТОФЕЛЬ, В. САЛОМАТОВ

ЛОКАЛЬНЫЕ ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛА KCl С ДВУХВАЛЕНТНЫМ АКТИВАТОРОМ.

1. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА

На основе двухзонной модели щелочногалоидного кристалла методом функций Грина развита теория системы локальных одноэлектронных уровней сложного центра симметрии C_{2v} , образованного двухвалентной катионной примесью и катионной вакансией. Учитывается искажение решетки около центра. Спины электронов не рассматриваются.

1. Двухвалентные положительные ионы металлов часто используются в щелочногалоидных кристаллофосфорах в качестве активирующих примесей. Например, введение ионов типа Sn^{2+} или Eu^{2+} приводит к возникновению центров свечения, а введение ионов типа Ca^{2+} — к возникновению целого ряда центров окраски. Свойства систем с активаторами типа Sn^{2+} сейчас интерпретированы достаточно хорошо, несмотря на отсутствие детальных теоретических расчетов. Меньше внимания обращалось на редкоземельные активаторы. Сами оптические спектры систем типа $KCl-TR^{2+}$ также могут быть интерпретированы [1-11] и даже в довольно далеко идущих деталях. Однако эксперимент показывает, что редкоземельные активаторы отнюдь не являются изолированными флуоресцирующими образованиями в кристалле [2, 4, 5, 12]. С их участием может идти целый ряд процессов рекомбинационного характера. Детальная интерпретация последних не ясна и точки зрения различных авторов здесь значительно расходятся. Особый интерес вызывает возможность локализации дырки около редкоземельного центра в широком интервале температур [4, 5, 12].

Интерпретация электронных процессов в кристаллах с примесями требует знания полной совокупности локальных энергетических уровней (включая их расположение относительно зон основания), возникающих под действием примеси [13]. В общих чертах речь идет об учете не только «собственно примесных» состояний, но и «индуцированных» локальных состояний, возникающих под возмущающим действием примеси из состояний ее соседей [14]. В более точной теории следует учитывать взаимодействие таких уровней одинаковой симметрии и дисперсию зон [13, 15]. Общим методом, позволяющим рассматривать в единой схеме полный набор локальных и зонных состояний, служит метод функций Грина [16-19]. Единственным известным нам конкретным применением его к щелочногалоидному кристаллофосфору является работа [15], где, развивая расчет [14], был вычислен набор локальных уровней центра $KCl-Tl$ ($1A_{1g}$).

Относительно сопровождающей двухвалентные активаторы совокупности локальных уровней с точки зрения теории практически ничего не известно. Эксперимент показывает, что в большинстве случаев избыточный по отношению к замещенному катиону заряд двухвалентной примеси компенсируется расположенной неподалеку катионной вакансией. Поэтому с введением примеси возникает целый набор центров, различающихся расположением этой вакансии. Для полного описания экспериментальных данных следует иметь в виду весь набор этих центров. Однако среди них, во всяком случае, присутствуют центры, в которых вакансия расположена в ближайшей к примеси катионной сфере (на расстоянии $a\sqrt{2}$ от нее) [6, 9, 10, 20, 21]. Именно такой центр, имеющий симметрию C_{2v} , мы и будем рассматривать в дальнейшем.* Можно ожидать интересной картины возмущения валентной зоны подобным сложным дефектом.

В настоящей работе на основе двухзонной модели ионного кристалла методом функций Грина сформулируем задачу о полной системе одноэлектронных локальных уровней щелочногалогенидного кристалла (KCl) с двухвалентным активатором (типа TR^{2+}). Результаты применения излагаемой здесь теории к конкретным системам будут приведены в последующих публикациях.

Спины электронов в нашей модели учитываться не будут, однако искажение решетки около центра будет принято во внимание.

2. Обозначим положение l -го иона в идеальном кристалле через R_l^0 , а в кристалле с дефектом через R_l . Начало координат поместим в примесном узле ($R_0^0=0$), а положение вакансии обозначим R_v . Под ее влиянием примесь сдвигается на ΔR_0 .

Уравнение, определяющее одноэлектронные состояния кристалла с дефектом, запишем в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) + V'(\mathbf{r}, \Delta R_0, R_v) + V''(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь $V(\mathbf{r})$ — периодический потенциал идеального кристалла (он считается не зависящим от рассматриваемого состояния). Слагаемое

$$V'(\mathbf{r}, \Delta R_0, R_v) = [U(\mathbf{r} - \Delta R_0) - U_0(\mathbf{r})] - U_0(\mathbf{r} - R_v) \quad (2)$$

учитывает изменение потенциальной энергии за счет внедрения примеси и наличия вакансии, причем U обозначает потенциал примеси, а U_0 — потенциал катиона основания. Слагаемое V'' учитывает изменение потенциальной энергии за счет сдвигов равновесных положений остальных ионов (за исключением примеси и вакансии) по сравнению с идеальным кристаллом.

Решение уравнения (1) будем в духе метода ЛКАО-МО искать в виде разложения

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{i, \alpha_i} C_{\alpha_i} \psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta R_0) + \sum_{\alpha, l \neq 0; v} C_{l\alpha} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r} - R_l), \quad (3)$$

где ψ_{α_i} — волновые функции свободного примесного иона в i -м энергетическом состоянии, вырожденные компоненты которого нумеруются значком α_i ; функции φ_{α} относятся к ионам матричного кристалла.

* Теория собственно примесных уровней двухвалентных активаторов (без увязывания с энергетическими зонами матрицы) развита в [22].

Принимая во внимание, что рассматриваться будет кристалл KCl, значение $\alpha = 0$ отвечает функции $4s$ -состояния K^+ , ортогонализированной** по методу Шмидта к функциям с $\alpha = 1, 2, 3$, которыми нумеруются $3p$ -функции свободного Cl^- .

Пусть функции φ_α удовлетворяют уравнениям

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \right] \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) = \varepsilon_\alpha^0 \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l). \quad (4)$$

Для анионов это просто уравнения свободных ионов, для катионных функций U_0 и ε_0^0 считаются подобранными так, чтобы решения (4) воспроизводили катионные $4s$ -функции, ортогонализированные к $3p$ -функциям анионов. Поскольку в дальнейшем будут использованы полуэмпирические матричные элементы для идеального кристалла [19], а при построении потенциала возмущения (2) мы будем пренебрегать поправками на неортогональность, то конкретное знание U_0 и ε_0^0 нам не понадобится.

Пусть волновые функции свободной примеси удовлетворяют уравнениям

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0) \right] \psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0) = \varepsilon_i \psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0). \quad (5)$$

Одну из функций оптических электронов примеси следует считать аналогом $4s$ -функции регулярного катиона, и мы будем ей сопоставлять индекс $\alpha_0 = \alpha = 0$.

Подставляя (2) в (1), с учетом (4) и (5) получим уравнения

$$E C_{m\beta} = \sum_{l,\alpha} (H_{ml}^{\beta\alpha} + W_{ml}^{\beta\alpha}) C_{l\alpha} + \sum_{i,\alpha_i} W_{m0}^{\beta\alpha_i} C_{\alpha_i} \quad (6)$$

для коэффициентов, определяющих вклад функций ионов основания и примесной функции — аналога $4s$ -функции замещенного катиона ($C_{00} = C_0$) — в возмущенную функцию, и уравнения

$$(E - W_{00}^{\beta_j\beta_j}) C_{\beta_j} = \sum_{i,\alpha_i \neq \beta_j} W_{00}^{\beta_j\alpha_i} C_{\alpha_i} + \sum_{\alpha,l \neq v} W_{0l}^{\beta_j\alpha} C_{l\alpha} \quad (7)$$

для определения вклада остальных примесных функций. Уравнения (6) и (7) образуют систему.

Элементы эрмитовой матрицы \hat{H} определены следующим образом:

$$H_{ml}^{\beta\alpha} = \varepsilon_\alpha^0 \delta_{ml} \delta_{\alpha\beta} + \int \varphi_\beta^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m^0) [V(\mathbf{r}) - U_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0)] \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l^0) d\tau \quad (8)$$

и имеют тот же физический смысл, что и в [15, 19].

Выражения для тех элементов матрицы возмущения, которые будут учтены в дальнейшем, приведем несколько позже.

Предположим, что можно пренебречь взаимодействием состояний примеси одинаковой симметрии в поле кристалла, т. е. величинами $W_{00}^{\beta_i\alpha_i}$ при $\beta_i \neq \alpha_i$. Это предположение должно быть обосновано в

** Используемые функции атомного типа для матричного кристалла должны быть взаимно ортогонализированы, поскольку этим свойством обладают «точные» волновые функции ионов в кристалле. Используемая несимметричная ортогонализация по Шмидту удобна для определения параметров возмущения примесью ее соседей.

каждом отдельном случае. В данном и некоторых других случаях относительная малость этих членов обуславливается тем, что соответствующее «смешивание» происходит лишь под действием сравнительно высоких гармоник потенциала кристалла. Тогда из (7) имеем

$$C_{\beta_j} = \sum_{\alpha, l \neq v} \frac{W_{0l}^{\beta_j \alpha} C_{l\alpha}}{E - W_{00}^{\beta_j \beta_j}}, \quad (9)$$

а уравнения (6) приводятся к виду

$$EC_{m\beta} = \sum_{l, \alpha} (H_{ml}^{\beta\alpha} + U_{ml}^{\beta\alpha}) C_{l\alpha}, \quad (10)$$

причем

$$\begin{cases} U_{ml}^{\beta\alpha} = W_{ml}^{\beta\alpha} + \sum_{i, \alpha_i} \frac{W_{m0}^{\beta\alpha_i} W_{0l}^{\alpha_i \alpha}}{E - W_{00}^{\alpha_i \alpha_i}}, & m, l \neq v; 0, \\ U_{mv}^{\beta\alpha} = W_{mv}^{\beta\alpha}, & U_{m0}^{\beta\alpha} = W_{m0}^{\beta\alpha}. \end{cases} \quad (11)$$

Уравнения (10) можно теперь переписать в матричном виде

$$(E - \hat{H} - \hat{U}) \hat{C} = 0. \quad (12)$$

3. Будем учитывать распространение возмущения со стороны примеси лишь на шесть ее ближайших соседей. При рассмотрении примесных и индуцированных из валентной зоны уровней (с учетом их взаимодействия) это приближение оправдано: у более далеких соседей уже заметно сказывается взаимная компенсация избыточных зарядов примеси и вакансии, а электронная оболочка примеси значительно перекрывается только с ближайшими соседями. Возмущение, вносимое одиночной катионной вакансией, приводит, по-видимому, в основном к изменению локальной плотности состояний в зоне проводимости.***

Таким образом, будут учитываться лишь следующие параметры возмущения:

примесные параметры

$$W_{00}^{00} = \int |\psi_0(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0)|^2 [V(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_v) + V''] d\tau + \varepsilon_0 - H_{00}^{00}, \quad (13)$$

$$W_{00}^{\alpha_i \alpha_i} = \varepsilon_i + \int |\psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0)|^2 [V(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_v) + V''] d\tau, \quad (14)$$

«индуцирующие» параметры

$$W_{ll}^{\alpha\alpha} = \int |\varphi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)|^2 [V'(\mathbf{r}, \Delta \mathbf{R}_0, \mathbf{R}_v) + V''] d\tau + \Delta H_{ll}^{\alpha\alpha}, \quad (15)$$

причем

$$\Delta H_{ll}^{\alpha\alpha} = (H_{ll}^{\alpha\alpha})'' - H_{ll}^{\alpha\alpha},$$

где $(H_{ll}^{\alpha\alpha})''$ рассчитывается по (8) с заменой \mathbf{R}_l^0 на \mathbf{R}_l ,

и «смешивающие» параметры

*** Несмотря на то, что мы не учитываем непосредственное возмущение зоны проводимости примесью, индуцированные из этой зоны локальные уровни могут, в принципе, в нашей схеме появляться из-за возмущения через валентную зону.

$$\begin{aligned}
 W_{i0}^{\alpha 0} &= \int \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) [V(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_v) + V''] \psi_0(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0) d\tau + \\
 &+ (\varepsilon_0 - E) \int \varphi_2^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \psi_0(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0) d\tau - H_{i0}^{\alpha 0}, \\
 W_{i0}^{\alpha \alpha_i} &= \int \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) [V(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_v) + V''] \psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}_0) d\tau + \\
 &+ (\varepsilon_i - E) \int \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \psi_{\alpha_i}(\mathbf{r} - \Delta \mathbf{R}) d\tau.
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Примесные параметры описывают сдвиги одноэлектронных уровней активатора при его внедрении в кристалл. «Индущирующие» параметры описывают разность сдвигов анионных уровней в дефектном и идеальном кристаллах. «Смешивающие» параметры описывают связь состояний свободной примеси с остальным кристаллом.

Нескомпенсированные в дефектной области поля избыточных зарядов примеси и вакансии приводят к заметному искажению их волновых функций, поэтому соответствующие поляризационные вклады должны быть учтены, по крайней мере, в примесных и «индущирующих» параметрах. Аналогично [22] можно показать, что ион-дипольное взаимодействие приводит к следующей форме этих поправок:

$$\begin{aligned}
 \Delta W_{00}^{\alpha_i \alpha_i} &= -\frac{e^2}{2} \cdot \frac{\mu_{0v}^{\alpha_i}}{R_{0v}^4}, \\
 \Delta W_{ll}^{\alpha \alpha} &= -\frac{e^2}{2} \left[\frac{\mu_{l0}^{\alpha}}{R_{l0}^4} + \frac{\mu_{lv}^{\alpha}}{R_{lv}^4} \right].
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Здесь R_{0v} и R_{l0} — расстояния между примесью и вакансией и между примесью и l -м ионом соответственно, а R_{lv} — расстояние между l -м анионом и вакансией; μ_{lm}^{α} — вклад в поляризуемость l -го иона, отвечающий одноэлектронному состоянию α , для поля, параллельного \mathbf{R}_{lm} .

4. Определив функцию Грина с элементами

$$G_{lm}^{\alpha\beta}(E) = \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{C_{l\alpha}^*(\mathbf{k}, n) C_{m\beta}(\mathbf{k}, n)}{E - E_n(\mathbf{k})},
 \tag{18}$$

где $E_n(\mathbf{k})$ — энергетический спектр $\hat{H}(\mathbf{k})$ (\mathbf{k} — волновой вектор, n — номер зоны), а $C_{l\alpha}(\mathbf{k}, n)$ — суть коэффициенты разложения собственной функции \hat{H} по функциям локализованного базиса, стандартным путем [15–18] приходим к следующему уравнению для определения локальных уровней:

$$\det |\delta_{lm} \delta_{\alpha\beta} - \sum_{t,\gamma} G_{lt}^{\alpha\gamma}(E) U_{tm}^{\gamma\beta}(E)| = 0.
 \tag{19}$$

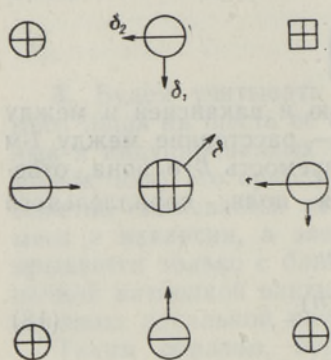
Поскольку в нашем приближении \hat{W} локализовано в дефектной области (примесь + 6 ближайших соседей), ранг определителя (19) не очень велик. Его порядок может быть еще больше понижен, если воспользоваться линейными комбинациями функций φ_{α} , преобразующихся по неприводимым представлениям группы симметрии центра (оператора \hat{U}). В данном случае — это группа C_{∞} .

Из 18 p -функций соседей примеси можно скомбинировать 6 полносимметричных (представление A_1) функций, 3 функции симметрии A_2 , 5 функций симметрии B_1 и 4 функции симметрии B_2 . Функция примеси $\alpha_0 = 0$ преобразуется согласно A_1 . Тем самым учет точечной симметрии

задачи понижает порядок определителя из (19) для A_1 -уровней до семи, для A_2 — до трех, для B_1 — до пяти и для B_2 — до четырех. Надо, однако, иметь в виду, что некоторые из элементов \hat{W} зависят от энергии вследствие других функций примеси, содержащихся в (3), и число решений уравнений (19) не совпадает с порядком определителя. Нами получен конкретный вид уравнений для определения энергий локальных уровней всех симметрий, однако их громоздкость не позволяет привести их здесь и они будут даны во вспомогательном издании.

5. В нашей задаче представляет интерес найти совокупность локальных уровней для примеси в основном и возбужденном состояниях (эти совокупности различны). Соответственно для основного состояния примеси в разложение (3) будут включаться лишь функции оптических электронов примеси в основном состоянии, а для возбужденного — функции примеси, отвечающие заполненным уровням примеси в возбужденном состоянии. В этих случаях используются различные потенциалы U и различные искажения решетки (если нас интересуют самоогласованные состояния).

Несмотря на отсутствие общего расчета искажения решетки около центра рассматриваемого типа, его характер можно установить на основании расчетов [6, 23, 24]. Для конкретной примеси сдвиги равновесных положений ионов можно получить привлекая ту или иную интерполяционную процедуру. Рисунок иллюстрирует искажение решетки.



Модель рассматриваемого центра в плоском сечении и характер искажения решетки.

Во-первых, ясно, что общие соседи иона Eu^{2+} и катионной вакансии должны иметь компоненты сдвигов, направленных к примеси (δ_1) [23, 25] и от вакансии (δ_2) [23, 26], а остальные соседи — сдвиги δ_1 в сторону примеси [23, 25]. Эта часть искажения была, например, рассчитана в [23] для KCl-Sr^{2+} ; KCl-Ca^{2+} ; KCl-Cd^{2+} . В работе [6] было отмечено, что сама примесь должна сдвигаться на δ в сторону вакансии и этот сдвиг может быть значительным. Наиболее реальная, на наш взгляд, оценка подобного смещения дана в [24]. Для возбужденного состояния изменение искажения можно оценить, принимая во внимание соответствующее изменение ионного радиуса примеси.

Сделаем еще некоторые замечания относительно используемых нами потенциалов. Как уже отмечалось, потенциал задачи строится на основании соответствующих атомных (ионных) потенциалов схемы Гайтлера—Лондона, т. е. самоогласование решений типа МО (к которым применима теорема Купмэнса и т. д.) не проводится. Потенциал V'' можно разбить на две части: $V'' = V''_1 + V''_2$, где V''_1 — обусловлено сдвигами δ_1 , а V''_2 — сдвигами δ_2 . Величину $V(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}) + V''_1$ при $r < a$ можно сконструировать как потенциальную энергию внесенного с примесью электрона в поле всех ионов, за исключением примесного. При этом будет учитываться неточность шести ближайших к примеси соседей. Соответствующие обменные взаимодействия учитываются приближенно по формуле типа Слэтера [27], причем учитывается только сферически-симметричная часть переразложения обменного потенциала на примесный узел. Точечную и электростатическую части $V = U_0 + V''_1$

разлагаем в ряд по кубическим гармоникам, учитывая гармоники 0-го и 4-го порядков. Коэффициенты этого разложения для точечной части потенциала при конфигурации идеального кристалла приведены в [28], а при учете сдвигов δ_1 шести соседей примеси — в [29]. Коэффициенты разложения для неточечной части нетрудно определить из требования правильного воспроизведения соответствующей части $V - U_0 + V_1''$ в направлениях от примеси к аниону и от примеси к катиону.

Величину $U(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{R}_0)$ можно сконструировать, пользуясь для обменного члена приближением [30]. В качестве $U_0(\mathbf{r})$ можно взять потенциальную энергию 4s-электрона в атоме калия. Выражения для V_2'' и V'' в индуцирующих параметрах можно взять в виде суммы разностей потенциалов соответствующих ионов в искаженной и неискаженной конфигурациях.

Авторы благодарны Г. Завту за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шамовский Л. М., Жванко Ю. Н., Мат-лы VII Совещ. по люминесценции, Тарту, 1959, с. 66.
2. Кирс Я. Я., Нийлиск А. И., Тр. ИФА АН ЭССР, 18, 36 (1962).
3. Reisfeld P., Glasner A., JOSA, 54, 333 (1964).
4. Parfianovich I. A., Shuraleva E. I., Ivahnenko P. S., J. Luminescence, 1/2, 657 (1970).
5. Парфианович И. А., Шуралева Е. И., Ивахненко П. С., Изв. АН СССР, Сер. физ., 31, 832; 835 (1967); 33, 844 (1969).
6. Bron W. E., Heller W. R., Phys. Rev., 136, A1433 (1964).
7. Wagner M., Bron W. E., Phys. Rev., 139, A223; A233 (1965).
8. Bron W. E., Phys. Rev., 140, A2005 (1965).
9. Fong F. K., Sundberg M. N., Heist R. H., Chliver C. R., Phys. Rev., 83, 50 (1971).
10. Bradbury R. E., Wong E. Y., Phys. Rev., B4, 690; 694; 711 (1971).
11. Baldini G., Guzzi M., Phys. stat. sol., 30, 601 (1968).
12. Chowdari B. V., Itoh N., Phys. stat. sol., 46b, 549 (1971).
13. Кристофель Н. Н., Тр. ИФА АН ЭССР, 32, 97 (1967).
14. Кристофель Н. Н., Изв. АН СССР, Сер. физ., 30, 1533 (1966).
15. Kristoffel N. N., Zavit G. S., Shulichenko B. V., Физика примесных центров в кристаллах, Таллин, 1972, с. 53.
16. Лифшиц И. М., ЖЭТФ, 17, 1017; 1076 (1947); 18, 293 (1948).
17. Koster G., Slater J., Phys. Rev., 95, 1167 (1954); 96, 1208 (1954).
18. Kristoffel N., Zavit G., Nuovo Cim., 61B, 331 (1969).
19. Завт Г. С., Кристофель Н. Н., Шуличенко Б. В., Хаин С. З., Препринт FAI-4, Тарту, 1970.
20. Röhrig R., Phys. Letters, 16, 20 (1965).
21. Nair P. G., Lingam K. V., Venkataraman B., J. Phys. Chem. Solids, 29, 2183 (1968).
22. Кристофель Н., Годкалнс А., Изв. АН ЭССР, Сер. физ. матем. и техн. н., 14, 507 (1965).
23. Bassani F., Fumi F. G., Nuovo Cim., 11, 274 (1954).
24. Weber W., Dick B. G., Phys. stat. sol., 36, 723 (1969).
25. Кристофель Н. Н., Тр. ИФА АН ЭССР, № 15, 3 (1961).
26. Кристофель Н. Н., Тр. ИФА АН ЭССР, № 17, 3 (1961).
27. Cowan R. D., Phys. Rev., 163, 54 (1967).
28. Абаренков И. В., Вестн. ЛГУ, № 16, 5 (1958).
29. Hutchings M. T., Solid State Phys., 16, 227 (1964).
30. Rozen A., Lindgren I., Phys. Rev., 176, 114 (1968).

Институт физики и астрономии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
7/XII 1971

Иркутский государственный университет
им. А. А. Жданова

N. KRISTOFFEL, V. SALOMATOV

KAHEVALENTSE AKTIVAATORIGA KCl-KRISTALLI LOKAALSED ÜHEELEKTROONSED SEISUNDID

I. Greeni funktsioonide meetod

Kasutades Greeni funktsioonide meetodit, on välja töötatud leelishalogenkristalli kaheksaosalises mudelis kahevalentse katioonilisandi ja katioonvakantsi poolt moodustatud C_{2v} -sümmeetriaga tsentri üheelektronsete lokaalnivoode süsteemi teooria. Elektronide spinne ei ole arvestatud, võre moonutust aga küll.

N. KRISTOFFEL, V. SALOMATOV

LOCALIZED ONE-ELECTRON STATES OF THE KCl CRYSTAL WITH A DIVALENT ACTIVATOR

I. The Green's function method

In the two-band model of an alkali halide crystal in the Green's function approach, a theory for the system of one-electron localized levels of the C_{2v} -symmetry centre consisting of a divalent impurity cation and a cationic vacancy is developed. The electron spins are ignored, the lattice distortion is taken into account.