

Н. КРИСТОФЕЛЬ

О ВОЗМОЖНОСТИ СОПОСТАВЛЕНИЯ L -ПОЛОС ПЕРЕХОДАМ В ПСЕВДОЛОКАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ

На коротковолновом спаде F -полосы наблюдаются так наз. L -полосы [1], сопоставляемые переходам, начинающимся из основного состояния F -центра. Единая точка зрения о характере конечных состояний в этих переходах отсутствует (см. [2-8]). В [2, 3] L -полосы сопоставляются переходу на возбужденные уровни образующихся при этом соседних атомов щелочи, а K -полоса обусловлена всеми остальными переходами (за исключением $1s \rightarrow 2p$, дающего F -полосу) в возбужденные состояния собственно F -центра [9]. Поэтому нам представляется естественным сопоставление L -полос переходам в псевдолокальные электронные состояния (ср., напр., [10] для колебательной задачи), возникающие под действием дефекта (вакансии) в зоне проводимости (ср. [6, 7]).

Ниже будет рассмотрено возможное число и симметрия подобных псевдолокальных состояний, способствующее интерпретации L -полос.

По аналогии со случаем колебаний (см. [11-14]) решение задачи о псевдолокальных электронных состояниях достигается методикой функций Грина в виде

$$b_l(\vec{R}_\alpha) = b_l^{(0)}(\vec{R}_\alpha) + \sum_{\beta, n} T_{\alpha\beta}^{ln} b_n(\vec{R}_\beta) \quad \alpha, \beta \in \Omega \quad (1)$$

$$\tilde{b}_m(\vec{R}_\alpha) = \tilde{b}_m^{(0)}(\vec{R}_\alpha) + \sum_{\beta, n} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{ln} b_n(\vec{R}_\beta) \quad \beta \in \Omega \quad (2)$$

Здесь $b_l(\vec{R}_\alpha)$ — коэффициенты для возмущенной волновой функции в разложении ее по центрированным на узле \vec{R}_α функциям ионов дефектной области Ω , а \tilde{b}_m — вне ее*. Индексы l, m различают отдельные зоны (функции различного типа, центрированные на одном узле). Матричные элементы оператора T , определяемого произведением матрицы возмущения и функции Грина, отличны от нуля только в области Ω , на которую распространяется возмущение. Энергетическая зависимость содержится в подлежащем определению спектральном распределении $b_l(\vec{R}_\alpha)$ через энергетическую зависимость T .

* Величины $b_l^{(0)}(\vec{R}_\alpha)$ для идеального кристалла суть $e^{\vec{k}_l \vec{R}_\alpha}$.

Уравнение (1) служит для установления свойств симметрии задачи и нахождения самих коэффициентов $b_l(\vec{R}_z)$ в дефектной области*. Эти свойства симметрии распространяются на более далекие узлы вне дефектной области по (2).

Точечная группа симметрии задачи задается симметрией матрицы возмущения (ср. [15]). Для перекрывающихся зон (зона проводимости определяется различными «одноионными» функциями) возможные типы симметрии и число псевдолокальных уровней определяются разложением приводимого базиса, образованного участвующими ионными функциями из области, на которую распространяется возмущение. При этом «одноионные» функции разных типов можно рассматривать отдельно с дальнейшей дополнительной диагонализацией (численной) базисов, относящихся к повторяющимся неприводимым представлениям. От последнего общее число искомых псевдолокальных уровней данной симметрии не изменится, хотя не все они обязательно в равной мере хорошо выражены (наличие узких пиков в спектральном распределении b_l).

В случае вакансии аниона в кристалле типа NaCl группой симметрии будет O_h . Возможные типы псевдолокальных электронных состояний в зависимости от различных функций на ближайших к вакансии первых трех слоях ионов приведены в нижеследующей таблице:

	1 соседи (кат.) s-функции	1 соседи (кат.) p-функции	2 соседи (ан.) s-функции	3 соседи (кат.) s-функции
Типы симметрии	A_{1g} E_g F_{1u}	A_{1g} E_g $2F_{1u}$ F_{2g} F_{2u} F_{1g}	A_{1g} E_g F_{1u} F_{2g} F_{2u}	A_{1g} A_{2u} F_{1u} F_{2g}

Основной уровень F -центра обладает симметрией A_{1g} , и в дипольном приближении разрешены переходы только на F_{1u} -уровни. Сопоставление L -полос подобным переходам показывает, что при зоне проводимости, слагающейся в нижней своей части из s - и p -функций ближайших соседей — катионов и s - (возможно d -) функций вторых соседей-анионов, если возмущению подвергаются в основном два слоя ионов вокруг дефекта (что разумно предположить** на основании существующих расчетов F -центров), следует наличие четырех L -полос в согласии с экспериментом. Остальные возможные F_{1u} -уровни лежат, по всей вероятности, выше и соответствующие « L -полосы» маскированы основным поглощением.

Из такой интерпретации следует, что три L -полосы должны определяться в основном природой катиона. Четвертая, отвечающая переходу в состояние, содержащее наибольший вклад от функций вторых соседей-анионов, этим свойством обладать не должна. Экспериментально уда-

* Отсюда не получаются состояния симметрий не возмущаемых примесью. Им соответствуют $b_l = 0$ в дефектной области.

** Добавочный электрон компенсирует для больших расстояний избыточный заряд вакансии.

ется максимумы L_1 , L_2 - и L_3 -полосы уложить на деформированную прямую энергий возбуждения катионов, в то время как L_4 -полоса несколько выпадает из этой зависимости [2, 3]. Из таблицы видно, что имеются также псевдолокальные состояния других симметрий, переходы на которые могут стать разрешенными благодаря колебаниям решетки [16]. Они могут дать растущий с температурой вклад в L -область спектра поглощения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lüty F., Z. Phys., **160**, 1 (1960).
2. Klick C., Kabler M., Phys. Rev., **131**, 1075 (1963).
3. Klick C., Phys. Rev., **137**, A1814 (1965).
4. Wood R., Phys. Rev. Lett., **11**, 202 (1963).
5. Gold A., Phys. Rev., **123**, 1965 (1961).
6. Kojima T., Intern. Symp. Color Centers in Alkali Halides, Urbana, Thesis, 1965, p. 87.
7. Bassani F., Intern. Symp. Color Centers in Alkali Halides, Urbana, Thesis, 1965, p. 14.
8. Simpson J., Intern. Symp. Color Centers in Alkali Halides, Urbana, Thesis, 1965, p. 135.
9. Smith D., Spinolo G., Phys. Rev., **140**, A2121 (1965).
10. Ребане К. К., Кристофель Н., Трифонов Е., Хижняков В., Изв. АН ЭССР. Сер. физ.-матем. и техн. наук, **13**, № 1, 87 (1964).
11. Завт Г. С., Тр. ИФА АН ЭССР, № 27, 69 (1964).
12. Завт Г. С., Кристофель Н. Н., ФТТ, **8**, 2273 (1966).
13. Callaway J., J. Math. Phys., **5**, 783 (1964).
14. Magadudin A., Repts Progr. in Phys., **28**, 331 (1965).
15. Кристофель Н. Н., Завт Г. С., Опт. и спектр., **20**, 673 (1966).
16. Кристофель Н. Н., Завт Г. С., ФТТ, **5**, 1279 (1963).

Институт физики и астрономии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
7/VI 1966

N. KRISTOFFEL

L-RIBADE VASTAVUSSE SEADMISE VÕIMALUSEST ÜLEMINEKUTELE PSEUDOLOKAALSETSESSE ELEKTRONSEISUNDITESSE

N. KRISTOFFEL

ON THE POSSIBLE CORRESPONDENCE OF THE L -BANDS TO TRANSITIONS INTO PSEUDOLocalized ELECTRON STATES