

ЛОКАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ  $Vk$ - И  $U$ -ЦЕНТРОВ В ШГК

В.Г.Мазуренко, И.А.Вайнштейн, В.С.Кортов

Эффективность рекурсивного метода для расчета щелевых и резонансных колебаний, индуцируемых собственными и примесными дефектами в ионных кристаллах, показана в работах [1,2]. Представляет интерес использование рекурсивного метода для расчета локальных колебаний, частота которых лежит выше максимальной частоты колебаний решетки идеального кристалла. Настоящая работа посвящена расчету локальных колебаний, индуцируемых в ШГК  $Vk$ - и  $U$ -центрами, рекурсивным методом в модели жестких ионов и оболочек.

При моделировании динамики решеток ШГК с  $Vk$ -центрами принимали заряд центра равномерно распределенным между ионами галогена, т.е. по  $-0.5e$ . В качестве межионных потенциалов использовали неэмпирические параметры, полученные для всех ШГК в модели Гордона-Кима [3]. Данные по релаксации решетки вокруг  $Vk$ -центра в различных ШГК взяты из работы [4]. Все расчеты проводили для кластера, состоящего из  $\sim 1500$  ионов.

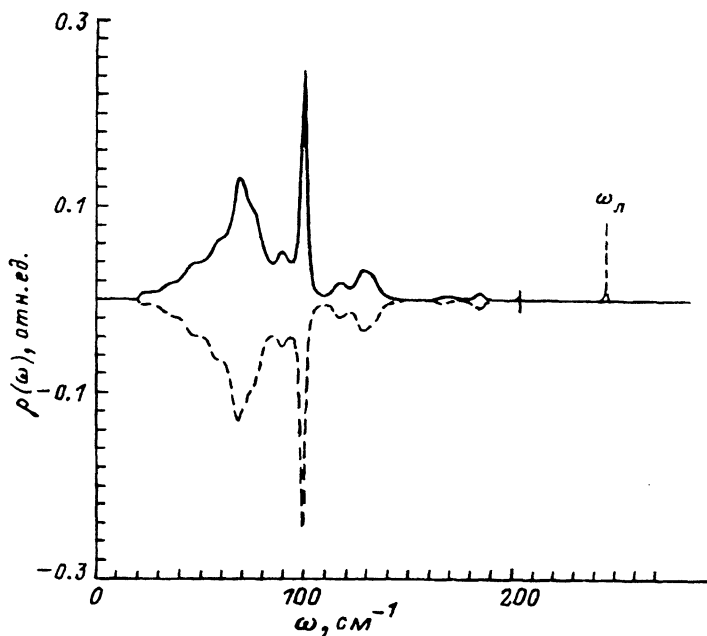
Локальную плотность состояний (ЛПС) рассчитывали по методике работы [1]. Отдельно определяли ЛПС в позиции катиона для идеального кристалла ( $\rho_0$ ) и в присутствии  $Vk$ -центра ( $\rho$ ), что давало возможность непосредственно выделять колебания, обусловленные наличием исследуемого дефекта.

На рисунке в качестве примера приведены ЛПС в позиции катиона в направлении  $x$  в идеальном кристалле RbCl (сплошная линия), а также приращение  $\Delta\rho = \rho - \rho_0$  ЛПС (штриховая линия) при наличии в кристалле RbCl  $Vk$ -центра. Максимумы в приращении ЛПС, не совпадающие с особенностями ЛПС идеального кристалла, мы связываем с резонансными или локальными колебаниями  $Vk$ -центра. Для кристалла RbCl это локальное колебание имеет частоту  $245 \text{ см}^{-1}$ . Результаты расчетов для других ШГК приведены в таблице.

Во всех изучаемых кристаллах, за исключением LiF, частоты внутримолекулярных колебаний  $X_2^-$  лежат выше максимальной частоты колебаний решетки идеального кристалла, и все эти колебания являются локальными. В кристалле LiF колебание на частоте  $455 \text{ см}^{-1}$  является резонансным. Наряду с высокочастотными колебаниями выделены низкочастотные резонансные колебания, а также щелевое колебание для кристалла KI ( $90 \text{ см}^{-1}$ ).

В таблице приведены экспериментальные значения частот локальных колебаний  $Vk$ -центров, полученные измерением спектров комбинационного рассеяния [5], а также расчетные данные [6,7].

Наблюдается хорошее совпадение наших результатов расчета высокочастотных колебаний  $Vk$ -центров с экспериментом, а также с результатами расчетов [6]. Имеется отличие в числе локальных колебаний для всех кристаллов (кроме KCl) в наших расчетах и в расчете, проведенном методом суперячейки.



ЛПС в позиции катиона для направления  $x$  в кристалле RbCl.

Сплошная линия — ЛПС в идеальном кристалле ( $\rho_0$ ), штриховая линия — приращение ЛПС  $\Delta\rho = \rho - \rho_0$  в кристалле с  $Vk$ -центром.  $\omega_l$  — частота локального колебания ( $245 \text{ см}^{-1}$ ).

Частоты колебаний ( $\text{см}^{-1}$ ) для  $Vk$ -центра в ШГК

Кристалл	Расчет			Эксперимент [5]	Максимальная частота для идеального кристалла
	васт. раб.	[6]	[7]		
LiF	455	449	494	$437 \pm 2$	665
	740				
NaF	486	120	560	-	414
	530	107			
	120				
KCl	245	238	288	$241 \pm 2$	210
	295	54			
	53				
RbCl	245	241	284	$244 \pm 2$	173
	52	49			
KI	90 (щ)	101	-	-	138
	180	32			
	22				

Примечание. щ — щелевое колебание.

На примере кристалла KI с  $U$ -центрами рассмотрена возможность использования рекурсивного метода для расчета локальных колебаний в модели оболочек.

Построение динамической матрицы в модели оболочек в реальном пространстве описано в работе [8]. Для выделения частот локальных колебаний, индуцируемых  $U$ -центрами в KI, рассчитывали симметризованные ЛПС в идеальном и дефектном кристаллах [9].

С использованием параметров взаимодействий ионов  $H^- - K^+$  и  $H^- - I^-$  [10] по описанной выше методике нами рассчитаны частоты локальных и щелевых колебаний в KI( $H^-$ ). Вычисления дают локальное колебание симметрии  $T_{1u}$  с частотой  $396.0 \text{ см}^{-1}$  и щелевое полносимметричное колебание  $A_{1g}$  с частотой  $99.4 \text{ см}^{-1}$ . Экспериментальные значения этих частот равны  $387.0 \text{ см}^{-1}$  [11] и  $95.1 \text{ см}^{-1}$  [12] соответственно.

Таким образом, хорошее согласие между результатами нашего расчета и экспериментом показывает эффективность использования рекурсивного метода для определения частот локальных колебаний заряженных и незаряженных дефектов, а также корректность используемых моделей центров. К сожалению, в настоящий момент для ШГК не имеется экспериментальных данных по низкочастотным модам  $Vk$ -центров. Поэтому мы не имеем возможности оценить для них адекватность полученных результатов по низкочастотным резонансам.

#### Список литературы

- [1] Мазуренко В.Г. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 11. С. 3399–3404.
- [2] Мазуренко В.Г., Кортов В.С. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С. 3034–3037.
- [3] Boyer L.L. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. N 8. P. 3673–3685.
- [4] Daly D.F., Miehler R.L. // Phys. Rev. 1969. V. 183. P. 368–383.
- [5] Goovaerts E., Schoemaker D. // Phys. Stat. Solidi (b). 1978. V. 88. P. 615–619.
- [6] Harding J.H. // J. Phys. C. 1980. V. 13. P. 3505–3510.
- [7] Jette A.N., Gilbert T.L., Das T.P. // Phys. Rev. 1969. V. 184. P. 884–896.
- [8] Мазуренко В.Г., Кислов А.Н. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1220–1225.
- [9] Мазуренко В.Г., Кислов А.Н. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 11. С. 3403–3408.
- [10] Hassain A.R., Sangster M.J.L. // J. Phys. C. 1986. V. 19. N 19. P. 3535–3547.
- [11] Schlaeger G. // J. Phys. Chem. Sol. 1960. V. 12. N 314. P. 233–244.
- [12] Gethins T., Timusk T., Woll E.J. // Phys. Rev. 1967. V. 157. N 3. P. 744–750.

Уральский государственный  
технический университет  
Екатеринбург

Поступило в Редакцию  
7 апреля 1993 г.