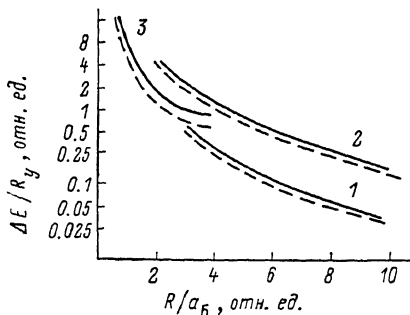


Все три функции удовлетворяют требованию ортонормированности, но при этом следует отметить, что если Ψ_1 и Ψ_2 хорошо определены для произвольных радиусов R , то выражение для Ψ_3 оправдано лишь для сравнительно малых значений R , так как в этой функции отсутствует множитель типа $\exp(-\alpha r_3)$, который обеспечивает связь электрона и дырки в экситон при больших значениях R . Включение же такого множителя в Ψ_3 привело бы к нарушению ортонормировки, что недопустимо.

Расчет зависимости энергетических уровней от радиуса микрокристалла выполняется путем минимизации функционалов

$$E_k = \langle H_k \rangle = \int_0^R dr_1 \int_0^R dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 r_1 r_2 r_3 \Psi_k H \Psi_k.$$

Результаты численных расчетов при значениях $\epsilon=20$ и $\epsilon_c=1$ приведены на рисунке (сплошные линии). Там же для сравнения изображены зависимости тех же уровней от R , рассчитанные в работе [1], без учета сил электростатического изображения (штриховые линии). Видно, что учет сил изображения качественно не изменяет



Зависимости сдвига энергетических уровней электронно-дырочной системы от радиуса кристалла.

1 — электрон и дырка в $1s$ -состоянии; 2 — электрон в $1s$ -, а дырка в $2s$ -состоянии (при $m_1=m_2$); 3 — электрон и дырка в p -состоянии.

характера зависимости от R энергетических уровней, но сдвигает их в область больших энергий. Для s -состояний величина сдвига максимальна в области $1 \leq R/a_B \leq 10$. По поводу сдвига p -состояния можно констатировать только то, что в исследуемой области значений R он несколько больший, чем для s -состояний в той же области. Это и понятно, так как в p -состоянии электрон и дырка оттесняются ближе к поверхности микрокристалла.

Список литературы

- [1] Kayanuma Y. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 14. P. 9797—9805.
- [2] Kayanuma Y. // Sol. St. Comm. 1986. V. 59. N 6. P. 405—408.
- [3] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // ФТП. 1982. Т. 16. № 7. С. 1209—1214.

Черновицкий
государственный университет

Поступило в Редакцию
27 февраля 1990 г.

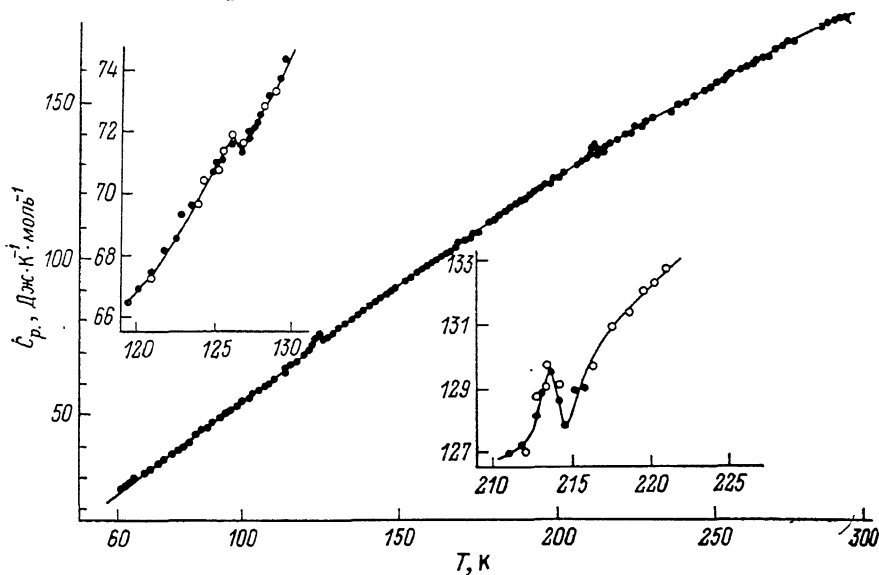
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛОВ $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$

Н. П. Теханович, А. У. Шелег, Я. В. Бурак

Тетраборат лития ($\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$), пр. группа $I41cd$, $a=9.477 \text{ \AA}$, $c=10.286 \text{ \AA}$, является хорошим пьезоэлектрическим материалом, представляющим значительный интерес для использования его в акустоэлектронике [1, 2]. Кристаллы тетрабората лития отличаются большой радиационной устойчивостью и механической прочностью, а также широкой спектральной

область пропускания света. Для использования кристаллов тетрабората лития в различных устройствах в качестве преобразователей ПАВ и ОАВ необходимо знание величин различных физических характеристик и их температурных зависимостей. В литературе имеются работы, посвященные исследованию влияния различных условий на процессы роста кристаллов $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$; в [3-5] приводятся результаты исследования диэлектрических, упругих, пьезоэлектрических и тепловых свойств этих кристаллов в зависимости от температуры. В [4, 5] на температурной зависимости скоростей ультразвуковых волн в области низких температур обнаружены аномалии в виде минимумов. Однако если в [4] эти минимумы наблюдаются при $T=92, 152, 182$ и 227 К, то в [5] — при $T=75, 125, 215$ и 318 К. Природа этих аномалий пока не выяснена.

Исследования теплоемкости в зависимости от температуры позволяют не только надежно регистрировать фазовые переходы различной природы,



Температурная зависимость теплоемкости тетрабората лития.

но и судить об энергетических изменениях, связанных с ними, а в ряде случаев — о механизме превращений. Учитывая это обстоятельство и неоднозначность результатов, полученных в [4, 5], нами проведены измерения теплоемкости C_p кристаллов тетрабората лития в интервале температур 60—300 К.

Измерения проводились в вакуумном адиабатическом калориметре при дискретной подаче тепла на образец. Установка с автоматическим регулированием температуры УНТО позволяет измерить теплоемкость с точностью 0.3%. В качестве образца был взят монокристалл тетрабората лития. Масса образца 15.07 г. Измерения теплоемкости проводились через 1—1.5 К во всей исследуемой области температур. В областях фазовых переходов проведено несколько серий измерений с температурным шагом 0.3—0.5 К. Скорость нагрева образца менялась от 0.02 до 0.1 К/мин.

Результаты измерения теплоемкости приведены на рисунке. В температурной области существования фазовых переходов проведено несколько серий измерений (см. рисунок). Видно, что на температурной зависимости теплоемкости тетрабората лития наблюдаются две ярко выраженных аномалии с максимумами при температурах 126.2 и 214 К. Энтальпии переходов, определенные методом графического интегрирования, равны 3.2 ± 0.2 и 7.3 ± 0.2 Дж/моль для фазовых переходов при 126.2 и 214 К соответственно.

Следует отметить, что в районе температур $\approx 180 \div 182$ и $\approx 225 \div 230$ К на температурной зависимости C_p наблюдается некоторый разброс экспе-

риментальных точек в отличие от очень плавной экспериментальной кривой в остальных областях температур. Однако этот разброс имеет хаотический характер и выделить минимум или максимум в этом районе по экспериментальным точкам не представляется возможным.

Природа аномалий, обнаруженных нами на температурной зависимости теплоемкости в тетраборате лития, пока не ясна. Для выяснения этого проводятся исследования других физических свойств и тонкой кристаллической структуры кристаллов тетрабората лития.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Shiosaki T., Adaki M., Kobajashi M., Araki K. // Jap. J. Appl. Phys. 1985. V. 24. N 1. P. 25—27.
- [2] Ebata Y., Suzuki H., Matsumura S., Fukuta K. // Jap. J. Appl. Phys. 1983. V. 21. N 3. P. 160—162.
- [3] Shiosaki T., Adachi M., Kawabata A. // ISAF86 Proc. sixth IEEE Int. Symp. on Application of Ferroelectrics. 1986. P. 455—464.
- [4] Борман К. Л., Бурак Я. В., Перро И. Т., Кундзиньш М. А., Лисейко И. Т. // Актуальные проблемы физики и химии сегнетоэлектриков. Рига. 1987. С. 140—153.
- [5] Sebery A. A., Somerford D. J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 12. P. 2279—2281.

Институт физики
твёрдого тела и полупроводников
АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
7 марта 1990 г.

УДК 539.219.3

© Физика твёрдого тела, том 32, № 8, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 8, 1990

МЕХАНИЗМ ПРОТЕКАНИЯ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ, БЛИЗКИХ К ПЛАВЛЕНИЮ

И. В. Удовичкий

При температурах, близких к плавлению, в твердом теле наблюдаются аномалии ряда физических свойств. Это приводит к необходимости введения понятия предрасплавленного состояния. Природа такого состояния связывается с образованием разупорядоченных областей в кристаллической решетке [1]. Считается, что к этому могут привести повышенное содержание дефектов и ангармонизм колебаний кристаллической решетки.

Образование неоднородной матрицы в предрасплавленном состоянии сказывается на ее свойствах переноса, в частности теплопроводности и диффузии. Однако для понимания этого явления с точки зрения теории перколяции необходимо, чтобы доля неоднородностей превышала величину порога протекания $\sim 16\%$ [2], что не подтверждается экспериментально. В связи с этим следует предположить, что возникающая в предрасплавленном состоянии система является динамичной, в которой перемещаются неоднородности и происходят гетерофазные флуктуации.

В настоящей работе предложен механизм переноса в неоднородной системе, в которой возможны флуктуации образования и перемещение областей ускоренного переноса (проводящие области) в блокирующей матрице. В такой системе, даже при полном пренебрежении переносом в матрице, перенос становится возможным и ниже порога протекания.

Рассмотрим диффузию в матрице, в которой распределение проводящих областей равномерно и поддерживается постоянной их концентрация. При эволюции структуры такой системы становится возможным осуществление дополнительного переноса при перераспределении вещества в образующихся проводящих областях и при их перемещении как целых. В дальней-