

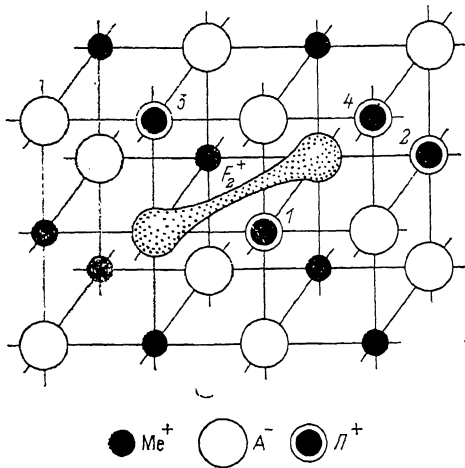
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ
СТРУКТУРЫ $(F_2^+)_A$ -ЦЕНТРОВ В NaCl И KCl

В. Н. Саломатов, Т. Г. Юрвева

Получение перестраиваемой по частоте генерации в ИК-области спектра при использовании в качестве активных элементов окрашенных щелочно-галлоидных кристаллов (ЩГК) послужило мощным стимулом для исследования природы и свойств лазерно-активных центров в этих кристаллах. Одной из важных групп F_2^+ -подобных лазерно-активных центров являются достаточно подробно к настоящему времени исследованные экспериментально $(F_2^+)_A$ -центры [1-10].

Теоретические оценки энергетических параметров таких дефектов, насколько нам известно, не проводились. Целью настоящей работы является расчет изменения энергетических параметров $(F_2^+)_A$ -центров относительно параметров F_2^+ -центров и сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными.

Рассмотренные возможные взаимные конфигурации F_2^+ -центров и примес-



Исследуемые модели $(F_2^+)_A$ -центров в ЩГК.

Me^+ — регулярный катион, A^- — регулярный анион, Pi^+ — примесный катион. Цифрами обозначены номера рассматриваемых взаимных конфигураций F_2^+ -центра и возмущающего примесного катиона.

ных катионов иллюстрируются рисунком. Методика расчета изложена в работе [11]. В таблице приведены результаты расчета для $(F_2^+)_A$ -центров в NaCl—K и KCl—Na. Здесь ΔE_g , ΔE_u — изменение энергии основного и первого возбужденного состояний F_2^+ -центра, $\Delta E = \Delta E_u - \Delta E_g$ — сдвиг бесфононной линии F_2^+ -центра под влиянием воздействия примесного катиона. В случае близости формы спектров невозмущенного и возмущенного центров величина ΔE может сопоставляться со сдвигом максимума спектра поглощения $(F_2^+)_A$ -центра относительно F_2^+ -центра. Верхний индекс у величин ΔE_g , ΔE_u , ΔE соответствует нумерации на рисунке взаимных конфигураций F_2^+ -центра и примесного катиона.

Как видно из приведенных результатов расчета, для обоих кристаллов в конфигурации 4 примесный ион не оказывает влияния на энергетические параметры F_2^+ -центров. В кристалле KCl—Na имеют место существенный коротковолновый сдвиг относительно полосы поглощения F_2^+ -центра для наиболее стабильной конфигурации 1 и сдвиг в длинноволновую сторону в случае 2 и 3 положений примесного иона. В эксперименте [1] для конфигурации 1 наблюдался коротковолновый сдвиг 0.126 эВ, что хорошо соответствует рассчитанной величине (0.13 эВ). Наибольший интерес, по нашему мнению, представляют результаты расчета для конфигураций 2 и 3 в KCl—Na, поскольку они показывают, что поглощение именно этих центров ($(F_2^+)_A$ в конфигурации 2 и 3), возникающих в результате перестройки $(F_2^+)_A$ -центров из конфигурации 1 под воздействием света накачки, может служить причиной обнаруженного в [1]

	KCl—Na	NaCl—K		KCl—Na	NaCl—K
	$\Delta E_{g_1}^1$	-0.13		0.15	$\Delta E_{u_3}^3$
$\Delta E_{g_2}^2$	-0.02	0.02	$\Delta E_{u_4}^4$	-0.00	0.00
$\Delta E_{g_3}^3$	-0.03	0.03	ΔE^1	0.13	-0.15
$\Delta E_{g_4}^4$	0.00	0.00	ΔE^2	-0.03	0.04
$\Delta E_{u_1}^1$	0.00	0.00	ΔE^3	-0.01	0.02
$\Delta E_{u_2}^2$	-0.05	0.06	ΔE^4	0.00	0.00

значительного уменьшения коротковолновой части спектра генерации (F_2^+)_A-центров в этом кристалле.

В случае NaCl—K имеет место несоответствие рассчитанного (-0.15 эВ) и наблюдаемого в эксперименте (-0.046 эВ) [9] сдвига максимума полосы поглощения, отнесенной в работе [9] (F_2^+)_A-центру в конфигурации 1. В более поздней работе [10] эта полоса связывается авторами с другими центрами окраски. Т. е. полосы поглощения (F_2^+)_A-центров в этом кристалле можно считать в настоящее время неидентифицированными. Результаты настоящего расчета позволяют предсказать положение максимумов полос поглощения и, следовательно, могут быть использованы при идентификации полос поглощения (F_2^+)_A-центров в кристалле NaCl—K.

Работа выполнена при финансово-организационной поддержке программы «Лазерные системы» Гособразования СССР.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Schneider J., Marrone M. J. // Opt. Lett. 1979. V. 4. N 12. P. 390—392.
- [2] Schneider J. // Opt. Lett. 1981. V. 6. N 3. P. 157—158.
- [3] Schneider J., Marquardt C. L. // Opt. Lett. 1981. V. 6. N 12. P. 627—628.
- [4] Гусев Ю. Л., Кирпичников А. В., Коноплин С. Н., Мареников С. И. // Квантовая электроника. 1981. Т. 8. № 6. С. 1376—1377.
- [5] Schneider J. // Opt. Lett. 1982. V. 7. N 6. P. 271—273.
- [6] Schneider J., Moss S. // Opt. Lett. 1983. V. 8. N 1. P. 7—8.
- [7] Schneider J., Pollock C. R. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 11. P. 6193—6198.
- [8] Schneider J. // Cryst. Latt. Def. and. Amorph. Mat. 1985. V. 15. P. 541—548.
- [9] Pinto J. F., Stratton L. W., Pollock C. R. // Opt. Lett. 1985. V. 10. N 8. P. 384—386.
- [10] Pinto J. F., Georgiou E., Pollock C. R. // Opt. Lett. 1986. V. 11. N 8. P. 519—521.
- [11] Саломатов В. Н., Юрьева Т. Г. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 6. С. 1801—1804.

Научно-исследовательский институт
прикладной химии
при Иркутском государственном университете

Поступило в Редакцию
12 августа 1991 г.