

Поскольку люминесценция с $\lambda=550$ нм соответствует переходам между уровнями одиночного Tl^+ -центра в кристаллической решетке, факт увеличения светосуммы люминесценции можно трактовать как результат гомогенизации примеси в результате движения дислокаций при деформировании кристалла. В случае кристаллов CsI (Na), где свечение связано с аннигиляцией экситонов, локализованных вблизи изолированных ионов натрия, т. е. имеет место не внутрицентровое, а косвенное возбуждение люминесценции, получены результаты, подобные данным для CsI (Tl).

В описанных экспериментах увеличение числа одиночных ионов примеси может происходить лишь за счет разрушения мелких скоплений примесных ионов. В [8] методом моделирования на атомном уровне взаимодействия скользящей краевой дислокации со скоплениями из пяти точечных дефектов было показано, что скопления могут разрушаться, атомы захватываться ядром дислокации и продолжать вместе с ней движение. При этом «эффективный радиус» такого взаимодействия может равняться нескольким параметрам решетки. При $\epsilon \approx 5-6\%$, в случае отсутствия локализации скользящего, дислокации проходят по каждой десятой атомной плоскости. Учитывая еще и эффективный радиус взаимодействия дислокации со скоплением примеси, получаем, что зона воздействия скользящих дислокаций на примесные скопления охватывает значительную часть кристалла и с увеличением ϵ возрастает.

Таким образом, использование активатора в качестве «люминесцентного зонда» является одним из возможных методов исследования особенностей взаимодействия дислокаций со скоплениями точечных дефектов. С другой стороны, полученные данные указывают на наличие в явлении деформационной люминесценции еще одного эффекта — деформационной сенсбилизации активированных кристаллов.

Л и т е р а т у р а

- [1] Шмурак С. З., Сенчуков Ф. Д. ФТТ, 1971, т. 13, № 2, с. 304—306.
- [2] Сенчуков Ф. Д., Шмурак С. З. ЖЭТФ, 1973, т. 65, № 6, с. 2358—2364.
- [3] Маркова-Осоргина И. А., Шмурак С. З. Письма в ЖЭТФ, 1976, т. 24, № 9, с. 514—517.
- [4] Birks J. B. The theory and practice of scintillation counting. Pergamon Press, Oxford—London—N. Y., 1967. 662 p.
- [5] Панова А. Н., Шахова К. В., Ширан Н. В. ЖПС, 1967, т. 6, № 4, с. 549—550.
- [6] Лурье А. М., Ситдиков А. М. Изв. АН Латв. ССР. Сер. физ. и техн. наук, 1983, № 2, с. 14—19.
- [7] Власов Г. И., Калнинь Р. А., Нагли Л. Е. Автометрия, 1980, № 1, с. 66—84.
- [8] Бакенов А. С., Кирсанов В. В. ФММ, 1986, т. 62, № 2, с. 241—247.

Институт физики АН ЛатвССР
Саласпилс
Рижский район

Поступило в Редакцию
11 января 1988 г.
В окончательной редакции
20 мая 1988 г.

ВЛИЯНИЕ F-ЦЕНТРОВ В КРИСТАЛЛАХ ТИПА NaCl НА ДИФфуЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

И. С. Брауде, А. В. Гектин, П. М. Глузман, В. Я. Серебрянный

Наличие в кристаллах точечных дефектов (ТД) приводит к деформации кристаллической решетки. Наиболее эффективным методом исследования наведенных ими искажений является изучение диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ). С помощью этого метода (путем анализа распределения интенсивности вблизи брэгговского максимума) удается

разделить вклады в упругие искажения ТД вакансионного и междоузельного типов, причем такие данные получены на многих металлах [1] и сплавах [2, 3].

Настоящая работа посвящена исследованию вклада ТД в искажения кристаллической решетки в кристаллах NaCl и KCl, методом ДРРЛ. Специфика этих кристаллов заключается в типе химической связи, в результате чего простейшие ТД оказываются заряженными. Рассмотрим простейшие (собственные) дефекты: v_a^+ , v_c^- , $v_a^+v_c^-$, F- и H-центры. Для них вариационным методом аналогично работе [4] рассчитывались равновесные конфигурации ионов, окружающих дефект. Величины смещений ионов ближайшего окружения рассмотренных дефектов для KCl следующие:

Тип дефекта	v_a^+	v_c^-	$v_a^+v_c^-$	F	$H_{\langle 111 \rangle}$	$H_{\langle 110 \rangle}$
Смещение, 10^{-8} см	0.17	0.16	0.15	-0.4	0.17	0.3

Знак «+» соответствует увеличению расстояния до центрального узла решетки, а «-» уменьшению. Видно, что для всех вакансионных конфигураций знак смещения положительный, такой же, как и для классических междоузельных конфигураций типа H-центра. Подобный характер смещения окружающих ионов вокруг v_a^+ и v_c^- получен расчетным путем и для LiF [5]. Это означает, что, несмотря на вакансионную природу, как одиночные вакансии, так и дивакансии должны проявляться в виде асимметрии распределения интенсивности ДРРЛ со стороны больших углов узла обратной решетки, что приводит к возрастанию «междоузельной» ветви в окрестности отражения. Лишь F-центр ($v_a^+e^-$) за счет стабилизирующего действия электрона обладает «эффективным объемом», меньшим, чем у иона аниона, и должен проявляться на «вакансионной» ветви зависимости интенсивности ДРРЛ от угла рассеяния.

Для проверки расчетных данных исследовалось ДРРЛ аддитивно окрашенных кристаллов (АОК) KCl и NaCl. Окрашивание проводилось путем отжига образцов при 680 °C в течение 6 ч в парах соответствующего щелочного металла. Контроль за состоянием F-центров и F—X превращением проводился спектрофотометрически. ДРРЛ измерялось на дифрактометре ДРОН-2.0 с использованием молибденового монохроматизированного излучения. Интенсивность J измерялась вблизи отражения (400) и (200) в направлениях вдоль волнового вектора рассеяния. Полученные зависимости J ДРРЛ от вектора смещения g или от угла рассеяния $\Delta \theta$ использовались для получения информации о дефектной структуре кристаллов. В измеренные J были внесены поправки, учитывающие комптоновское, фоновое рассеяние; проведение приведение полученных значений J к абсолютным единицам. Описанная процедура позволила построить графики зависимостей $\lg J$ от $\lg g/H$ (H — вектор обратной решетки). Эти зависимости имели линейный ход. Основным параметром, используемым для анализа степени искаженности структуры, являлся тангенс угла наклона α в анализируемых графиках.

Анализ распределения J ДРРЛ для АОК KCl, содержащих только F-центры либо только X-центры (F—X превращение проводилось отжигом образцов при 300 °C в течение 9 ч), показал присутствие в обоих случаях дефектов вакансионного типа. Рассчитанные величины α оказались равными 2.1 для кристалла с F-центрами. После F—X превращения величина α изменяется незначительно и близка к α для исходного KCl. Полученные значения α и асимметрия в распределении J ДРРЛ со стороны меньших углов указывают на то, что в обоих случаях в кристалле присутствуют дефекты со слабыми полями смещений, убывающими по кулоновскому закону [6]. Отсутствие значительных искажений в кристаллах с X-центрами свидетельствует о высокой когерентности включений с матрицей и может трактоваться в рамках гипотезы [7, 8] о структуре X-центра в виде упорядоченной ГЦК решетки F-центров. Образование металлических коллоидных частиц в этом случае не происходит, так как оценки показывают, что выделение ОЦК калия в решетке KCl занимает больший

объем, чем эквивалентное количество молекул K^+Cl^- , и должно было бы проявляться в виде «междоузельного» дефекта.

Аддитивное окрашивание $NaCl$ приводит к образованию коллоидных частиц, окруженных метастабильной фазой аналогично [8]. В этом случае ДРРЛ обнаруживает наличие дефектов вакансионного типа, как и должно быть в данном случае, поскольку в отличие от KCl в $NaCl$ выделение ОЦК натрия меньше, чем объем эквивалентного по количеству молекул кристаллита Na^+Cl^- . Величина искажений вблизи дефектов в $NaCl$ такая же, как и в KCl , а именно $\alpha \approx 2$.

Продолжительный отжиг (600 °С, 4 ч) АОК $NaCl$ приводит к постепенному растворению вначале метастабильной фазы, а затем и коллоида за счет стока F-центров на свободные поверхности [8]. При этом в результате закалки до комнатной температуры в кристалле остаются лишь вакансии (по-видимому, в основном $v_a^+v_c^-$). И действительно, ДРРЛ для таких образцов обнаруживает искажение «междоузельной» ветви, согласуясь с расчетными данными для вакансий.

Л и т е р а т у р а

- [1] Ehrhart P. Elektronen Bestrahl. Ber. Kerntorschungsanlage. Jülich, 1971, N 810' p. 1—48.
- [2] Чуистов К. В. Модулированные структуры в стареющих сплавах. Киев: Наукова думка, 1975. 228 с.
- [3] Ямалеев К. М. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей стареющими сплавами. М.: Наука, 1973. 96 с.
- [4] Вараксин А. Н., Колмогоров Ю. Н. Деп. ВИНТИ, 1985, № 1878-85. 34 с.
- [5] Шлюгер А. Л. Автореф. докт. дисс. М., 1987. 40 с.
- [6] Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967. 336 с.
- [7] Chassagne G., Durand D., Serughetti J., Hobbs L. W. Phys. St. Sol., 1977, vol. A40, N 2, p. 629—640.
- [8] Гектин А. В., Птицын Г. В., Розенберг Г. Х. ФТТ, 1985, т. 27, № 5, с. 1391—1394.

НПО «Монокристаллреактив»
Харьков

Поступило в Редакцию
23 мая 1988 г.

УДК 537.311

Физика твердого тела, том 30, в. 10, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 10, 1988

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПОЛИМОРФНЫЕ ПЕРЕХОДЫ КРИСТАЛЛОВ $LiIO_3$

Н. А. Захаров, А. В. Егоров, Н. С. Козлова, О. Г. Портнов

Настоящая работа посвящена рассмотрению температурных зависимостей пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей в известном пьезоэлектрике $LiIO_3$.

Для исследований использованы ориентированные монокристаллы оптического качества, полученные методом испарения растворителя при контролируемом отборе конденсата. Кристаллы относились к α -фазе $LiIO_3$ гексагональной модификации; параметры элементарной ячейки: $a=5.48 \text{ \AA}$, $b=5.17 \text{ \AA}$; пр. гр. $R6_3$. Диэлектрические проницаемости измеряли мостовым методом, измерительное напряжение 2 В, $f=1000 \text{ Гц}$. В качестве электродов использовали графитовую пасту. Измерение компонент матрицы пьезомодулей (см. таблицу) проводили в одном температурном цикле с измерением диэлектрической проницаемости с использованием квазистатического метода [1] ($f=100 \text{ Гц}$) в динамическом режиме изменения температуры (50—75 град/ч) при непрерывной записи сигналов, пропорциональных измеряемым величинам. Точности измерения