

- [1] Рыжиков В. Д. Монокристаллы и особо чистые вещества. М., 1984.
 [2] Thomas D. G. J. Phys. Soc. Japan, 1966, v. 21, p. 265—271.
 [3] Рыжиков В. Д., Лисецкая Е. К., Силин В. И. Монокристаллы, их получение и свойства. Харьков, 1982, с. 46—51.
 [4] Рыжиков В. Д., Лисецкая Е. К., Силин В. И. Радиационные явления в широкозонных оптических материалах. Ташкент, 1979, с. 179—180.
 [5] Bhargava R. N. J. Cryst. Growth, 1982, v. 59, N 1—2, p. 15—26.
 [6] Омеляновский Э. М., Фистуль В. И. Примеси переходных металлов в полупроводниках. М.: Металлургия, 1983. 192 с.
 [7] Cuthbert J. D., Thomas D. G. J. Appl. Phys., 1968, v. 39, N 3, p. 1573—1580.
 [8] Рыжиков В. Д., Чайковский Э. Ф. Изв. АН СССР. Сер. физ., 1979, т. 43, № 6, с. 1150—1154.

Киевский государственный университет
им. Т. Г. Шевченко

Поступило в Редакцию
4 марта 1987 г.

Журнал технической физики, т. 58, в. 3, 1988

НОВЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ ЦЕНТР В ОКСИДЕ БЕРИЛЛИЯ

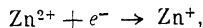
И. Н. Анцыгин, В. Ю. Иванов, А. В. Кружалов

Известно, что изоэлектронные примеси в широкощелевых оксидах существенно влияют на процессы радиационного дефектообразования и динамику электронных возбуждений. Однако для BeO настоящая проблема не изучена.

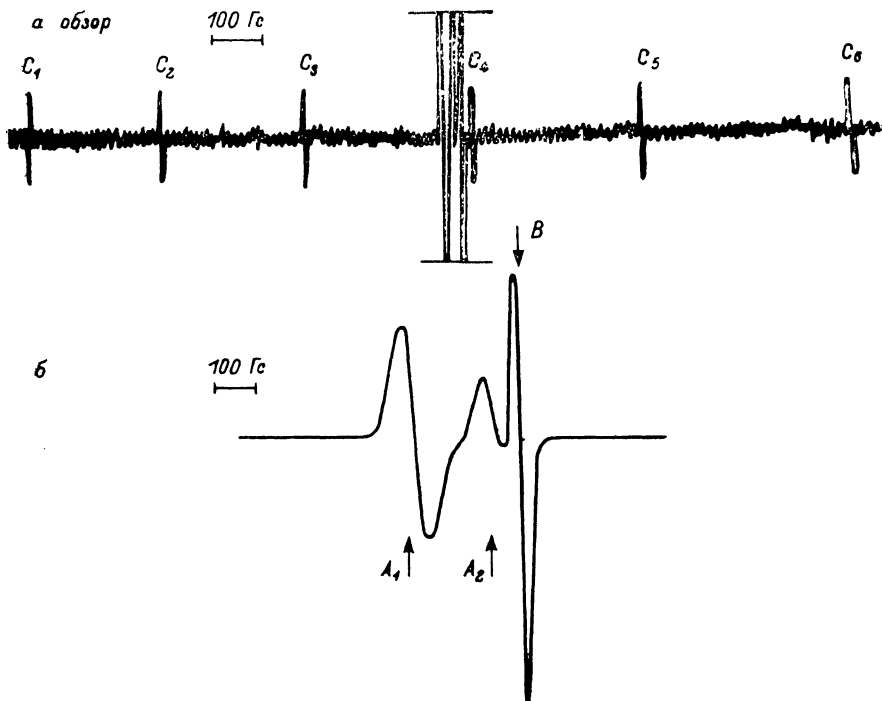
Из-за плотнейшей гексагональной упаковки и малого радиуса Be^{2+} (0.34 \AA) оксид бериллия обладает малой изоморфной емкостью. Целенаправленное легирование BeO является затруднительным, а концентрация примесей, как правило, не превышает фоновую уровня. Ранее мы контролировали концентрацию примесных ионов Li, V и Al методом ЭПР и ТСЛ и изучали их влияние на радиационно-оптические свойства BeO [1]. Роль этих и других примесных ионов в оксидах II группы также хорошо исследована. Однако роль цинка как изовалентной примеси в оксидах II группы остается неизученной. В настоящем сообщении приведены результаты, свидетельствующие об обнаружении нового парамагнитного центра (ПЦ) в оксиде бериллия, легированного цинком.

Исследованы кристаллы $\text{BeO}-\text{Zn}$, выращенные Масловым по методике [2] с добавлением в шихту 2 мас. % ZnO . Спектры ЭПР измерены на радиоспектрометре РЭ-1302, работающем в X-диапазоне по супергетеродинамной схеме. Применялась 100 кГц-модуляция магнитного поля. Измерения проведены при 77 К с использованием иммерсионного кварцевого криостата. Нерентгенованные кристаллы $\text{BeO}-\text{Zn}$ диамагнитны, так как ионы Zn^{2+} , если они изовалентно заместили Be^{2+} , имеют заполненную внешнюю оболочку $3d^{10}$. После облучения при 77 К рентгеновскими лучами (трубка БСВ-2Fe, 40 кВ, 10 мА, 20 мин) в спектрах ЭПР кристаллов $\text{BeO}-\text{Zn}$ наблюдается ряд линий. На рисунке приведены обзорный спектр (а) и его центральная часть (б). Наряду с известным центром V_M (ассоциат V^- -центра и примеси V^{3+} или Al^{3+} в позиции Be^{2+}), которому принадлежат линии A_1 и A_2 , наблюдаются ранее неизвестные новые линии спектра ЭПР. Интенсивная одиночная линия B с $g=2.0008 \pm 0.0005$ и полушириной 2.4 Гс является изотропной. Секстет слабых ($\sim 0.7\%$ от интенсивности B -линии) неэквидистантных линий C примерно равной интенсивности является также изотропным. Радиационное накопление обоих типов сигналов происходит одностадийно по одинаковому закону. Исследование температурной стабильности показало, что новые линии ЭПР спектра исчезают при температуре 310 К. Эти факторы указывают на то, что в данном случае мы имеем дело с одним и тем же ПЦ, который можно связать с примесью цинка. Если предположить, что одиночная линия обусловлена цинком с нулевым ядерным спином, то секстет линий может быть интерпретирован как сверхтонкая структура (СТС) спектра от изотопа Zn^{67} со спином ядра 5/2. Соотношение интенсивностей секстета и одиночной линии и процентное содержание Zn^{67} в изотопном составе цинка (4.11 %) находятся в хорошем соответствии.

На основе экспериментальных данных можно предложить следующую модель нового ПЦ в ВеО. Ион Zn^{2+} изоморфно замещает Be^{2+} в регулярных узлах решетки. Из-за значительного расхождения их ионных радиусов ($R_{Zn^{2+}}/R_{Be^{2+}} \approx 2.5$) возникает искажение решетки, катионный узел приобретает эффективный положительный заряд, увеличивая тем самым сечение захвата электрона на $4S$ -оболочку цинка



S — состояние электрона ПЦ Zn^+ является причиной изотропности как одиночной линии, так и секстета спектра ЭПР. Более низкая температурная стабильность Zn^+ (310 К) в сравнении с известными электронными ПЦ в ВеО [3] V^{2+} и Al^{2+} (540 К) объясняется существенно меньшим эффективным зарядом катионного узла, так как вхождение бора и алюминия в ре-



Спектр ЭПР при 77 К кристалла ВеО—Zn.

а: обзорный спектр. C_1 — C_6 — компоненты СТС от Zn^{67} , центральные линии ограничены по амплитуде; б: центральная часть. A_1 , A_2 — линии, принадлежащие V_{II} -центру; B — линия от Zn^+ центра.

шетку является гетеровалентным. Отметим, что центры типа Zn^+ обнаружены ранее в кальците [4].

Для рассмотренной модели можно предложить следующий спингамильтониан:

$$\mathcal{H} = g\beta H \hat{S}_z + hA \hat{S}_z I_z + \frac{hA}{2} (\hat{S}_+ I_- + \hat{S}_- I_+).$$

Здесь первое слагаемое отвечает за зеемановское расщепление, второе и третье — за сверхтонкое взаимодействие (СТВ). Введение третьего слагаемого вызвано требованием учета членов второго порядка теории возмущений. Необходимость этого следует из неэквидистантности линий СТС. Параметры спин-гамильтониана определены следующим образом: g -фактор вследствие изотропности непосредственно из экспериментальных данных $g = 2.0008 \pm 0.0005$; постоянная СТВ A из анализа вклада в энергетические уровни члена $(hA/2) (\hat{S}_+ I_- + \hat{S}_- I_+)$ для $I = 5/2$ и $S = 1/2$ во втором порядке теории возмущений. Получены зависимости, связывающие параметр A и резонансные значения магнитного поля линий СТС. Расчетное значение $A = 901 \pm 5$ МГц.

Таким образом, в ВеО обнаружен новый парамагнитный центр Zn^+ изучены его свойства, предложена модель, определены вид и параметры спин-гамильтониана. Не исключена возможность, что ионы Zn^{2+} в ВеО могут захватывать не только электроны, но и образовывать дырочные центры типа V_{Zn} . Косвенным указанием на эту возможность является тот факт, что

при термической диссоциации Zn^+ (310 К) не наблюдается изменения концентрации известных дырочных центров за счет рекомбинации и электронных центров за счет перезахвата высвободившихся электронов. Обнаружение нового ПЦ Zn^+ указывает на необходимость поиска специфических особенностей электронных возбуждений и люминесценции в $BeO-Zn$.

Авторы благодарят С. В. Горбунова, Т. Н. Кярнера, И. Н. Огородникова за помощь в работе и полезные дискуссии.

Литература

- [1] Кружалов А. В., Анцыгин И. Н., Гиниятуллин К. Н. и др. Тез. докл. V Всес. симпозиума по люминесцентным приемникам и преобразователям ионизирующего излучения Таллин, 1985, с. 70—71.
- [2] Маслов В. А., Рылов Г. М., Мазуренко В. Г. и др. Расширенные тезисы Междунар. конф. по росту кристаллов. М., 1980, с. 268—269.
- [3] Гиниятуллин К. Н., Кружалов А. В., Шульгин Б. В. В кн.: Радиационно-стимулированные явления в твердых телах. Свердловск, 1982, с. 3—12.
- [4] Popescu F. F., Grecu V. V. Sol. St. Commun., 1973, v. 13, N 7, p. 749—751.

Уральский политехнический институт
им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
7 марта 1987 г.

УДК 539.186.3

Журнал технической физики, т. 58, в. 3, 1988

О ВЛИЯНИИ КАСКАДНЫХ ПЕРЕХОДОВ НА ЗАСЕЛЕННОСТЬ ВОЗБУЖДЕННЫХ УРОВНЕЙ ПРИ НЕУПРУГИХ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

А. И. Бажин, В. Ю. Жадько, С. В. Теплов

В работе [1] была предложена статистическая модель возбуждения атома при неупругих атомных столкновениях средних энергий. В рамках подхода, изложенного в [1], вычисляется вероятность заселения возбужденного уровня в результате перехода электрона из основного состояния. Однако многие возбужденные состояния, особенно низколежащие, могут заселяться и за счет каскадных электронных переходов с вышележащих уровней. С этим фактом, в частности, связана большая интенсивность резонансных оптических атомных линий, чаще всего используемых в аналитических целях. Необходимость учета каскадного заселения возбужденных состояний связана и с тем, что структура каскада, используемая при расчете, позволяет учесть различные правила отбора и вероятность переходов, известные из спектроскопических таблиц, но игнорируемые в рамках статистического подхода. В настоящей работе произведен учет влияния каскадных переходов на заселенность возбужденных уровней, получаемую в рамках статистической модели [1].

Пусть $N(t, Q)$ — число атомов, возбуждаемых в единицу времени в столкновениях, в которых атому неупруго передана энергия в единичном интервале вокруг Q ; $n_l(t)$ — число атомов, находящихся в момент t в l -м возбужденном состоянии; $P_l(Q)$ — плотность вероятности прямого возбуждения l -го состояния в неупругом столкновении; A_{lk} — вероятность перехода из l -го в k -е состояние в единицу времени; g_l — кратность l -го состояния. Для $n_l(t)$ можно записать уравнение (взаимодействием с излучением пренебрегаем)

$$\frac{dn_l}{dt} = g_l N P_{0l} + \sum_{k>l}^m n_k A_{kl} - \sum_{k<l} n_l A_{lk}, \quad (1)$$

где индекс « m » отвечает наиболее высоколежащему уровню, который требуется учесть при расчете. Если, например, l -й уровень относится к нейтральному атому, то при $Q < E_i$ m определяется из условия $E_{\alpha\alpha}^m \leq Q < E_{\alpha\alpha}^{m+1}$, где $E_{\alpha\alpha}^m$, $E_{\alpha\alpha}^{m+1}$ — энергии возбуждения m -го и $(m+1)$ -го уровней, E_i — энергия ионизации. При $Q \geq E_i$ суммирование по k в (1) проводится по всем возбужденным состояниям нейтрального атома, каскадно связанным с l -м уровнем.