

5. Gillet V. Nucl. Phys., 88, 321, 1966
6. Живописцев Ф. А., Московкин В. М., Юдин Н. П. «Изв. АН СССР», сер. физич., 30, 306, 1966.
7. Живописцев Ф. А., Московкин В. М., Юдин Н. П. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 1, 109, 1967.
8. Капитонов И. М. Кандидатская диссертация. НИИЯФ МГУ, 1969; Письма в ЖЭТФ, 7, 210, 1968.
9. Балашов В. В. ЖЭТФ, 42, 275, 1962.

Поступила в редакцию  
19.3 1970 г.

НИИЯФ

УДК 548.0:535

А. Я. ГОЙХМАН

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЭКСИТОНОВ В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ И КРИСТАЛЛАХ БЛАГОРОДНЫХ АТОМОВ

В настоящей работе исследуется роль эффекта Яна-Теллера в релаксации решетки, сопровождающей процесс генерации экситонов. Экспериментально установлено, что электронная структура экситонов в рассматриваемых кристаллах соответствует образованию двухатомных молекул [1, 2], однако теоретического объяснения этого явления нет, хотя и были выполнены некоторые расчеты, основывавшиеся на такой модели [3, 4].

Первое возбужденное состояние инертного атома и иона галоида в рассматриваемых кристаллах соответствует неприводимому представлению  $F_{1u}$  группы  $O_h$ . Наличие вырождения приводит к тому, что ближайшие к данному атому или ионы

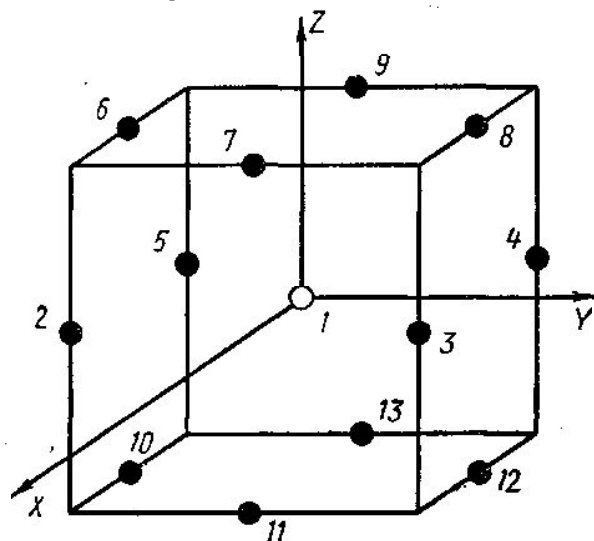


Рис. 1. Расположение атомов (ионов) в исследуемой квазимолекуле

сместятся таким образом, что вырождение будет снято [5]. Если рассматривать ближайшие ионы как некую квазимолекулу, то ее симметрия понизится. Законность выделения такой квазимолекулы следует из того, что основную роль во взаимодействии между атомами (ионами) играют быстро убывающие силы обменного взаимодействия. В случае кристаллов благородных атомов это очевидно, так как рассматривается взаимодействие одинаковых атомов, один из которых находится в возбужденном состоянии. В щелочно-галогидных кристаллах возбужденный анион теряет электрон, превращаясь в нейтральный атом, который может взаимодействовать лишь с анионами второй координационной сферы. Компактные ионы щелочного металла, составляющие первую сферу, не могут образовывать общие молекулярные орбитали с атомом галоида. Это

означает, что для обоих типов кристаллов мы получаем одну и ту же квазимолекулу (см. рис. 1), центральный атом или ион, у которого отсутствует один из  $p$ -электронов, и его 12 соседей. Активными по отношению к эффекту Яна-Теллера будут те нормальные колебания, которые содержатся в  $[F_{1u}^2]$ :

$$[F_{1u}^2] = A_{1g} + E_g + F_{2g}. \quad (1)$$

Колебания  $E_g$  и  $F_{2g}$  входят в полное представление  $D$ , осуществляемое всеми колебаниями координатами

$$D = A_{1g} + A_{2g} + A_{2u} + E_u + 2E_g + 3F_{1u} + 2F_{1g} + 2F_{2g} + F_{2u} \quad (2)$$

два раза, поэтому для нахождения нормальных колебаний необходимо решить вековое уравнение.

Это легко сделать, построив координаты симметрии и считая взаимодействие между атомами (ионами) центральным. При этом получены следующие выражения для смещений, соответствующих нормальным колебаниям  $E_g(g_1, g_2, g_3, g_4)$  и  $F_{2g}(g_5, g_6, g_7, g_8, g_9, g_{10})$ :

$$\vec{g}_1 = \frac{1}{6} [\vec{x}_2 + \vec{x}_3 - \vec{x}_4 - \vec{x}_5 + 2\vec{y}_6 + \vec{z}_7 - 2\vec{y}_8 + \vec{z}_9 - 2\vec{y}_{10} - \vec{z}_{11} - 2\vec{y}_{12} - \vec{z}_{13} + \sqrt{3}(\vec{y}_2 - \vec{y}_3 - \vec{y}_4 + \vec{y}_5 + \vec{x}_7 - \vec{x}_9 + \vec{x}_{11} - \vec{x}_{13})], \quad (3)$$

$$\vec{g}_2 = \frac{1}{6} [\vec{y}_2 - \vec{y}_3 - \vec{y}_4 + \vec{y}_5 + 2\vec{z}_6 - \vec{x}_7 + 2\vec{z}_8 + \vec{x}_9 - 2\vec{z}_{10} - \vec{x}_{11} - 2\vec{z}_{12} + \vec{x}_{13} - \sqrt{3}(\vec{x}_2 + \vec{x}_3 - \vec{x}_4 - \vec{x}_5 - \vec{z}_7 - \vec{z}_9 + \vec{z}_{11} + \vec{z}_{13})], \quad (4)$$

$$\vec{g}_5 = \frac{1}{4} [(V\sqrt{5}-1)(-\vec{z}_2 + \vec{z}_3 + \vec{z}_4 - \vec{z}_5 + \vec{y}_7 + \vec{y}_9 - \vec{y}_{11} - \vec{y}_{13}) + \vec{y}_6 - \vec{z}_6 + \vec{y}_8 + \vec{z}_8 - \vec{y}_{10} - \vec{z}_{10} - \vec{y}_{12} + \vec{z}_{12}], \quad (5)$$

$$\vec{g}_6 = \frac{1}{4} [(V\sqrt{5}-1)(\vec{z}_2 + \vec{z}_3 - \vec{z}_4 - \vec{z}_5 + \vec{x}_6 + \vec{x}_8 - \vec{x}_{10} - \vec{x}_{12}) + \vec{x}_7 + \vec{z}_7 + \vec{x}_9 - \vec{z}_9 - \vec{x}_{11} + \vec{z}_{11} - \vec{x}_{13} - \vec{z}_{13}], \quad (6)$$

$$\vec{g}_7 = \frac{1}{4} [(V\sqrt{5}-1)(-\vec{x}_6 + \vec{y}_7 + \vec{x}_8 - \vec{y}_9 - \vec{x}_{10} + \vec{y}_{11} - \vec{x}_{12} - \vec{y}_{13}) + \vec{y}_2 - \vec{x}_2 + \vec{x}_3 + \vec{y}_3 + \vec{x}_4 - \vec{y}_4 - \vec{x}_5 - \vec{y}_5]. \quad (7)$$

Смещения, соответствующие колебаниям  $q_3, q_4$  и  $q_8, q_9, q_{10}$ , получаются из приведенных выше изменением знака перед  $\sqrt{3}$  и  $\sqrt{5}$  на противоположный. На рис. 2 изображены смещения, соответствующие нормальным колебаниям  $q_4$  и  $q_7$ .

Аналогичную процедуру можно применить для нахождения правильных функ-

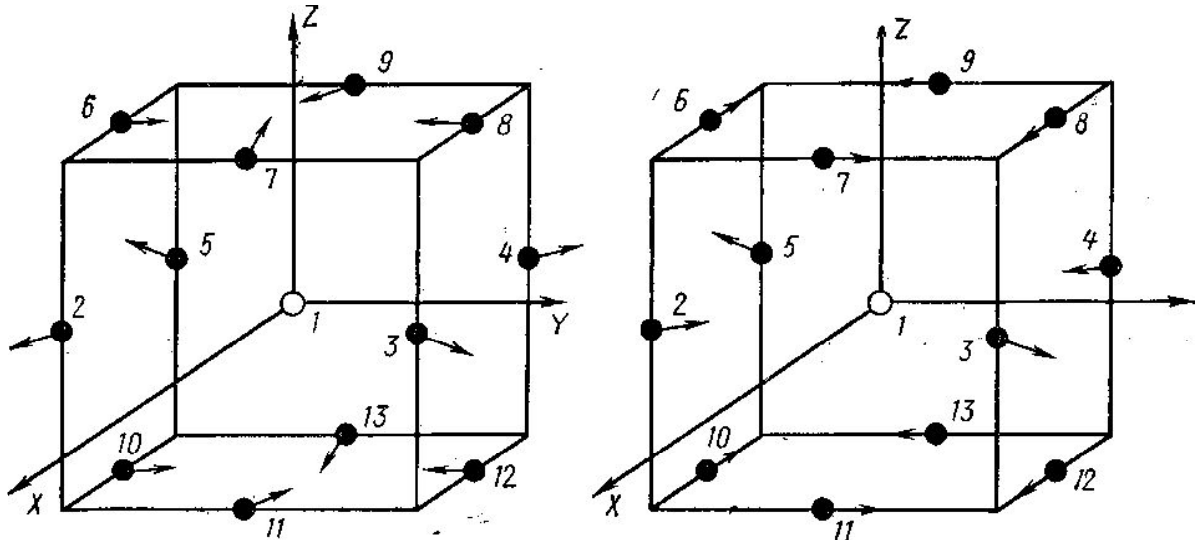


Рис. 2. Смещения атомов, соответствующие нормальным колебаниям  $q_4$  и  $q_7$

ций нулевого приближения. При этом возникает необходимость решения векового уравнения четвертого порядка, но в нашем случае можно ограничиться лишь построением базисных функций. Так как возбуждение на центральном атоме велико, то вероятность перехода дырки с первого атома на соседний определяется перекрытием волновых функций соответствующих  $p$ -электронов. Направление валентной связи должно соответствовать направлению максимального значения волновой функции, так как в таком направлении перекрытие волновых функций будет наибольшим. Следовательно, большее понижение энергии вызовет смещения, способствующие уве-

личению интеграла перекрытия. Так, если излучение поляризовано параллельно оси  $\{110\}$ , возможен переход в состояние  $\Phi_{1,x+y}$  (в атоме отсутствует электрон, орбиталь которого ориентирована вдоль оси  $\{110\}$ ), более сильно взаимодействует с колебаниями  $q_7$  и  $q_{10}$ , приводящими к образованию молекулярной орбитали

$$\psi = a\Phi_{1,x+y} + b(\Phi_{3,x+y} + \Phi_{5,x+y}). \quad (8)$$

Это соответствует образованию между двумя атомами связывающей, а между другими — разрыхляющей молекулярной орбитали. Таким образом, релаксация решетки, вызванная эффектом Яна—Теллера, приводит к образованию возбужденных двухатомных молекул в кристаллах благородных атомов и молекулярных ионов  $X_2^-$  в щелочно-галогидных кристаллах. Зная энергию связи в молекуле  $Cl_2$  ( $\sim 2,5$  эв), энергии сродства к электрону молекулы  $Cl_2$  ( $\sim 1,7$  эв) и атома  $Cl$  (3,6 эв), можно оценить энергию образования иона  $Cl_2^-$  из атома и иона хлора с помощью так называемого кругового цикла  $\varepsilon \approx 0,6$  эв. Это означает, что эффект Яна—Теллера является статическим. Большая величина  $\varepsilon$  подтверждает необходимость учета образования двухатомных молекул при анализе электронной структуры экситонов.

Автор благодарен Ю. М. Попову за руководство в выполнении данной работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Murray R., Keller F. Phys. Rev., 137, A942, 1965, 153, 993, 1967.
2. Jortner J., Meyer L., Rice S. A., Wilson E. G. J. Chem. Phys., 42, 4250, 1967.
3. Wood R. E. Phys. Rev., 151, 629, 1966.
4. Кудыкина Т. А., Топтыго К. Б. «Физика твердого тела», 10, 2049, 1968.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.

Поступила в редакцию  
23.3 1970 г.

НИИЯФ

УДК 537.533.35

Н. Н. СЕДОВ

## ОТОБРАЖЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ МИКРОПОЛЕЙ В НЕПРОСВЕЧИВАЮЩИХ ЭЛЕКТРОННЫХ МИКРОСКОПАХ

В работе [1] получены формулы, определяющие контраст изображения на экране непросвечивающих электронных микроскопов (эмиссионного, зеркального и растрового) при наблюдении поверхностей твердых тел с электрическими или магнитными микрополями на них. Найдены общие закономерности образования контраста для всех трех типов приборов. Для расчета контраста задача разделяется на два этапа: рассчитывается смещение электронов  $S(x, y)$  под действием микрополей и затем изменение яркости на экране под действием этого смещения. Величина смещения  $S(x, y)$  на экране прибора (отнесенная к объекту) выражается формулой

$$S(x, y) = C_1 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta}{(\xi^2 + \eta^2)^\lambda}, \quad (1)$$

где  $f(x, y)$  — напряженность одного из компонентов микрополя на поверхности, а параметры  $C_1$  и  $\lambda$  зависят от типа прибора. Чаще всего встречается случай  $\lambda = 3/4$ . Это соответствует, например, случаю электрических и магнитных полей, наблюдаемых в электронном зеркальном микроскопе, электрических полей в эмиссионном микроскопе с апертурной диафрагмой и т. д.

Формула (1) существенно упрощается для случая одномерных микрополей зависящих только от одной координаты. Решая (1) относительно функции  $f(x, y)$ , можно выразить ее в явном виде, что дает решение обратной задачи. Большинство практических применений этого метода измерения параметров объекта связано с использованием формул для одномерных микрополей.

Однако имеется важный класс двумерных задач, которые допускают также простое решение как прямой, так и обратной задачи о контрасте изображения. Это