

**ДВОЙНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНЫЙ РЕЗОНАНС F-ЦЕНТРОВ В КС1  
(ДАЛЕКИЕ КООРДИНАЦИОННЫЕ СФЕРЫ)**

*С.С.Ищенко, Н.П.Баран, М.Ф.Дейген, М.А.Рубан*

Метод двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) позволяет изучить сверхтонкое взаимодействие примесных центров в кристалле с большим числом ядер решетки. Это дает возможность определить ряд

свойств таких центров, выяснить их природу, топографию, пространственное распределение плотности электронного облака. При этом информация получается тем полнее, чем большее число ядер решетки удается включить в рассмотрение.

Особенно важными являются результаты измерений сверхтонкого взаимодействия с далекими ядрами, так как это позволяет изучить асимптотику волновой функции локализованного электрона. Последнее существенно, в частности, для определения структуры зоны проводимости и тензора эффективных масс [1].

Наиболее хорошо методом ДЭЯР изучено сверхтонкое взаимодействие  $F$ -центров в щелочно-галогидных кристаллах (см., например, [2,3]). В таких работах обычно регистрировались сигналы от ядер не более восьми координационных сфер.

В [4,5] удалось преодолеть этот предел и измерить сверхтонкое взаимодействие электрона  $F$ -центра с ядрами вплоть до шестнадцатой координационной сферы.

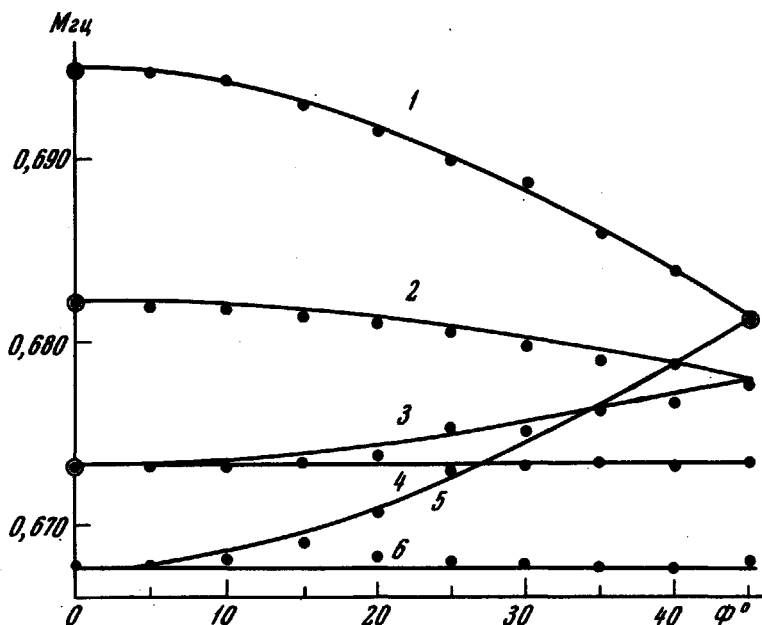


Рис.1. Угловые зависимости суммарных частот ДЭЯР ядер  $K^{39}$  сфер XXV и XLIX. Сплошными линиями показан ход теоретических кривых, точками — эксперимент. Линия 1,5,6 — сфера XXV, линии 2,3,4 — сфера XLIX. Кружками обозначены точки, по которым определены константы

В настоящем сообщении приводятся результаты исследования сверхтонкого взаимодействия  $F$ -центров в KCl с ядрами координационных сфер XXV([500]) и XLIX([700])<sup>\*</sup>.

Для измерений использовались монокристаллы KCl с концентрацией  $F$ -центров  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

Измерения проводились на супергетеродинном спектрометре ДЭЯР, работающем в трехсантиметровом диапазоне длин волн ( $\nu_{\text{свч}} = 9290 \text{ МГц}$ ) при температуре  $T = 20^\circ\text{К}$ .

Для описания экспериментальных результатов использовалось следующее выражение для частот ДЭЯР [5].

$$h\nu = h\nu_{\text{д}} \pm \frac{1}{2}[\alpha + b(3\cos^2\alpha - 1)], \quad (1)$$

где  $\nu_{\text{д}}$  — ядерная ларморовская частота,  $\alpha$ ,  $b$  — константы изотропного и анизотропного сверхтонкого взаимодействия соответственно,  $\alpha$  — угол между постоянным магнитным полем  $H_0$  и направлением дефект-ядро, знак  $\pm$  соответствуют значению проекции спина электрона на ось квантования (суммарные и разностные частоты).

Вращение образца производилось в плоскости (001). Угол  $\Phi$  между кристаллографической осью [100] и магнитным полем  $H_0$  изменялся в пределах  $0-45^\circ$ .

На эксперименте наблюдались ДЭЯР вблизи ларморовской частоты ядер  $\text{K}^{39}$  ( $\nu_{\text{д}} = 0,661 \text{ МГц}$ ). Симметричное расположение линий относительно этой частоты позволило опознать суммарные и разностные час-

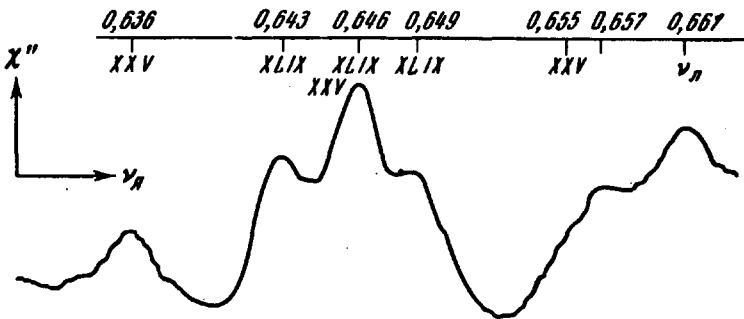


Рис.2. Спектр разностных линий ДЭЯР ядер  $\text{K}^{39}$  сфер XXV и XLIX,  $\Phi = 35^\circ$ .  $\chi''$  — мнимая часть парамагнитной восприимчивости,  $\nu_{\text{д}}$  — частота радиочастотной подсветки. Под метками частоты указан номер сферы, которой принадлежит линия

тоты. Угловая зависимость линий, как суммарных так и разностных, хорошо прослеживалась во всем диапазоне углов и соответствовала сферам, ядра которых лежат на кристаллографических осях. Ширина наблюдаемых линий была примерно одинакова и составляла  $0,002 \text{ МГц}$ . При изменении угла линии не деформировались и не изменяли своей ширины. Полагая, что спад сверхтонкого взаимодействия при удалении от вакансии на постоянную решетки сильнее, чем возможное возрастание за счет осцилляции волновой функции, мы в соответствии с величинами констант отнесли наблюдаемые линии к сферам XXV и XLIX.

Следует отметить трудности и возможную неоднозначность при идентификации линий далеких сфер, даже если известна их угловая зависи-

мость. Так для сфер, обладающих симметрией  $C_{2v}$ , тензор анизотропного сверхтонкого взаимодействия, вообще говоря, не является аксиально симметричным, а его главная ось  $r_3$  не совпадает с направлением дефект-ядро. В этом случае будут справедливы формулы, приведенные в [5], которые, в отличие от (1), будут содержать два дополнительных параметра, определяемых экспериментально: константу анизотропного сверхтонкого взаимодействия  $b_2$ , характеризующую отклонение от аксиальной симметрии, и  $\phi$  — угол между  $r_3$  и ближайшей кристаллографической осью. Если в этих формулах  $b_2$  и  $\phi$  устремить к нулю, угловая зависимость линий ДЭЯР для таких сфер будет вырождаться в угловую зависимость сфер, ядра которых лежат на кристаллографических осях. При выполнении условия

$$b_2 = 0, \quad \phi = 0; \quad (2)$$

эти угловые зависимости тождественны.

Если обозначить через  $\phi_{\text{я}}$  угол между направлением дефект-ядро и ближайшей кристаллографической осью, то величину отклонения  $r_3$  от направления дефект-ядро можно характеризовать, сравнивая величины  $\phi_{\text{я}}$  и  $\phi$  (например их разностью). Для близких к вакансии сфер, обладающих симметрией  $C_{2v}$ , экспериментально определенные  $\phi$  [3,5] не отличались существенно от  $\phi_{\text{я}}$ . С увеличением расстояния от дефекта взаимодействие ядра с электроном F-центра всё с большей степенью точности можно рассматривать как взаимодействие двух точечных магнитных диполей. Тогда, по-видимому, для далеких сфер с достаточной степенью точности можно считать  $b_2 = 0$ ,  $\phi = \phi_{\text{я}}$ , т.е. полагать, что имеет место аксиальная симметрия и  $r_3$  совпадает с направлением дефект-ядро.

#### Т а б л и ц а

Константы сверхтонкого взаимодействия F-центра в KCl  
с ядрами сфер XXV и XLIX

Сфера	Константа	Величина константы, Мгц
XXV	a	0,030
	b	0,018
XLIX	a	0,029
	b	0,006

Учитывая вышесказанное, мы, пользуясь формулой (1), графическим методом построили по измеренным константам в возможный спектр линий при некоторых углах  $\Phi$  для сфер с малым  $\phi_{\text{я}}$  и сравнили с наблюдае-

мым на эксперименте. Оказалось, что никакие другие сферы, кроме XXV и XLIX, не могли быть использованы для объяснения экспериментально полученной картины линий ДЭЯР. Однако, не исключена возможность, что какая-либо из исследованных сфер может оказаться более близкой сферой с малым  $\phi_{\text{я}}$ , если отклонение  $\gamma_3$  от направления дефект-ядро для нее будет достаточно большим.

Тот факт, что нам не удалось обнаружить линий от сфер, расположенных ближе к вакансии, но ядра которых расположены далеко от кристаллографических осей, по-видимому, обусловлен сильной локализацией волновой функции вдоль направления типа [100].

Возле линии, обозначенной на рис.1 цифрой 2, при  $\Phi = 0^\circ$  наблюдалась еще одна линия ДЭЯР. Ее, как и несколько плохо разрешаемых линий вблизи ядерной ларморовской частоты  $K^{39}$ , идентифицировать пока не удалось.

На рис.2 показан спектр линий ДЭЯР ядер  $K^{39}$  сфер XXV и XLIX,  $\Phi = 35^\circ$ .

Измеренные константы приведены в таблице.

Авторы выражают благодарность В.В.Удоду за приготовление образцов и в В.Г.Грачеву за обсуждение результатов работы.

Институт полупроводников  
Академии наук Украинской ССР

Поступило в редакцию  
8 декабря 1967 г.

#### Литература

- [1] В.Г.Грачев, М.Ф.Дейген, С.И.Пекар. ФТТ, 9, 3157, 1967.
- [2] W.C.Holton, H.Blum. Phys. Rev., 125, 89, 1962.
- [3] H.Seidel. Zs. Phys., 165, 218, 1961.
- [4] W.T.Doyle. Phys. Rev., 131, 555, 1963.
- [5] М.Ф.Дейген, М.А.Рубан, С.С.Ищенко, Н.П.Баран. ЖЭТФ, 51, 1014, 1966.

---

\* Вопросы идентификации сфер обсуждаются в конце сообщения.