

## ПАРАМАГНИТНЫЕ БЕРИЛЛИЙСОДЕРЖАЩИЕ ПРИМЕСНЫЕ ДЕФЕКТЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ MgO-Be

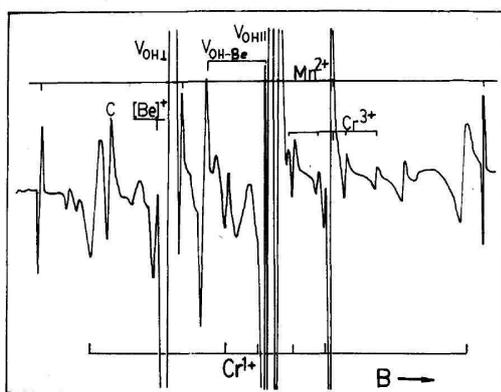
Тажигулов Б.Т.

Бұнда, MgO кристалында,  $Mg^{2+}$  ионды алмастыратын,  $Be^{2+}$  ионы электрондыда және кемтікті де қабылдап, сәйкес,  $Be^{1+}$  және  $Be^{2+}O^-$  яғни  $([Be]^{1+})$  ахауларын түзе алады. MgO-Be кристалында байқалатын 6,2 эВ – жарқыл, электрондық қабылдануда және кемтіктік қосылыс кезінде байқалады. Жарық шығара қосылу бериллий ионында электронның қосылып тұрақтануында да және оттегі ионында кемтіктің тұрақтануында да болады.

*It is shown that ions  $Be^{2+}$  the noting ions  $Mg^{2+}$  inside of MgO are capable to seize both the electrons and the holes with the formation  $Be^{1+}$  and  $Be^{2+}O^-$  of centers accordingly. The observed in the crystals MgO-Be glow with appears both with the electronic and with the p-type stages of the relaxation as a result of the radiative recombination of localized on the ion beryllium of electron and the localized on oxide ion hole.*

В данной статье излагаются результаты исследования монокристаллов **MgO-Be** и порошковых образцов **MgO-Be** методами ЭПР\*, ФЛ, РЛ и ТСЛ. Осуществлено исследование захвата электронов и дырок на мелких уровнях, вызванных примесными центрами, где условия локализации близки к условиям автолокализации носителей заряда в **MgO**.

В спектрах ЭПР монокристаллов и порошковых люминофоров **MgO-Be**, X-облученных при 77 К, наблюдается ряд линий, принадлежащих уже известным примесным ( $Mn^{2+}, Fe^{3+}, Cr^{3+}, Cr^{1+}$ ) или дырочным ( $V_{OH}, V_0, V^-$ ) центрам. Если для порошковых образцов **MgO-Be** мы не обнаружили новых линий ЭПР, то для монокристаллов наряду с известными линиями наблюдается спектры ЭПР ранее неизвестных центров, которые на рис.1 обозначены как  $V_{OH-Be}, Be^{2+}O^-$  ( $[Be]^{1+}$  центр) и С-центр. Наблюдаемая во всех исследованиях кристаллах линия, обозначенная нами буквой С, принадлежит не идентифицированному дырочному центру, который разрушается при 330<sup>0</sup>К и с которым мы связываем пик ТСЛ при этой температуре



**MgO-Be при 77 К  $\nu = 9,136 \text{ ГГц}; \vec{B} // \langle 100 \rangle$**

**Рис.1 – Спектр ЭПР монокристалла**

$V_{OH-Be}$  – центр. В спектре ЭПР монокристалла **MgO-Be** наблюдаются линии, приписываемые нами центру  $V_{OH-Be} (Be^{2+}O^- V_C H^+ O^{2-})$

\* электронный парамагнитного резонанса (ЭПР)

Центр возникает при облучении кристалла и наблюдается как при 77<sup>0</sup> К, так и при 295<sup>0</sup> К. Интерпретация центра основывается на следующем.

1) По кривым термического разрушения (рис.2) центр является дырочным. Из угловой зависимости спектра ЭПР следует, что центр обладает тетрагональной симметрией, ось центра ориентирована по <100>.

2) Сверхтонкую структуру (СТС) спектра ЭПР центра удается удовлетворительно объяснить, если предположить, что неспаренная дырка взаимодействует с двумя ядрами, спины которых  $I_1 = 1/2$  и  $I_2 = 3/2$ .

Для рассматриваемой модели с использованием выражения для спинового гамильтониана, учитывающего вклад квадрупольного взаимодействия с ядром  $Be$  во втором порядке возмущения [1], была моделирована СТС центра для ориентации магнитного поля, перпендикулярной оси центра. Согласно этой модели структура спектра вызвана наложением 8 линий СТС, положения которых в приближении используемой теории даются выражением:

$$B = B_0 - \frac{1}{g_{\perp}\beta} \left\{ m_H A_{H\perp} + \left[ m_{Be} A_{Be\perp} + \text{sign}(m_{Be}) \frac{3(P_{\perp} - P_{\parallel})^2}{2A_{Be}} \right] \right\}$$

где  $m_H = \pm 1/2, m_{Be} = \pm 1/2, 3/2; B_0 = h\nu / g_{\perp}\beta$ ; остальные обозначения соответствуют общепринятым или являются тривиальными. Положения соответствующих линий при последовательном учете разных членов этой формулы приведены на рис. 1. Вид моделированного спектра хорошо согласуется с экспериментальным.



Рис.2 Спектр ЭПР

Спектр ЭПР  $V_{OH-Be}$  – центра в монокристалле  $MgO - Be$  при 295 К;  $\nu=9,136$  ГГц;  $\vec{B} \parallel (100)$ ; а-общий вид спектра; б-низкополевая часть спектра, соответствующая центрам, оси которых перпендикулярны магнитному полю. Приведена модель центра и вычисленные теоретические положения линий СТС.

Удается непосредственно наблюдать проявление квадрупольного взаимодействия, которое приводит к относительному ослаблению центральной линии СТС по сравнению со второй и четвертой линиями.

3) Параметры центра, подогнанные методом наименьших квадратов, удовлетворительно согласуется с принятой моделью центра:

$$g_{11} = 2.0023 \pm 0.010; \quad g_{\perp} = 2.0249 \pm 0.010;$$

$$A_{H\perp} = (0.84 \pm 0.02)Gc; \quad A_{H\parallel} = \pm(1.90 \pm 0.02)Gc;$$

$$|A_{Be\perp}| = 0.69 \pm 0.02Gc; \quad |A_{Be\parallel}| \ll |A_{Be\perp}|$$

Главные компоненты тензора сверхтонкого взаимодействия для водорода  $A_{H\perp}$  и  $A_{H\parallel}$  очень близки к соответствующим значениям для  $V_{OH}$  – центра №

Вычисленные на основе этих результатов константы изотропного и анизотропного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) для бериллия равны:

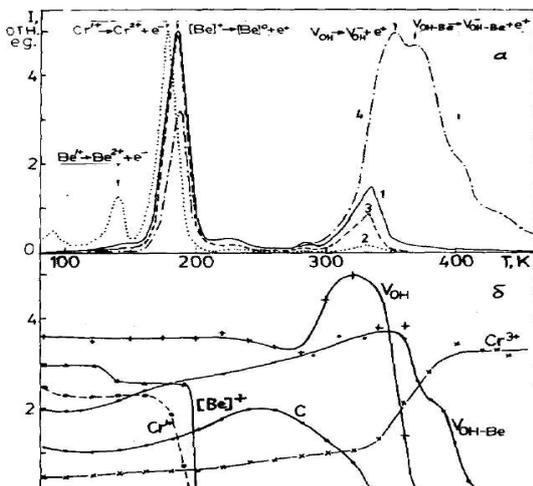
$$a_{Be} = \pm 1,30 \text{ МГц}, \quad B_{Be} = \mp 0,65 \text{ МГц}.$$

Учитывая,  $l = \gamma_e \gamma_{Be} h^2 \left( \frac{1}{e^3} + \frac{12 \langle r^2 \rangle}{5 e^5} \right) [2]$ ,  $l$ -расстояние между ядром бериллия и

ионом кислорода, на котором локализована неспаренная дырка,  $\langle r^2 \rangle$  – среднее значение квадрата величины  $\mathbf{p}$ -функции иона кислорода,  $\gamma_e$  и  $\gamma_{Be}$  – гиромагнитные отношения для электрона и ядра  $Be$ , соответственно, найдем, что расстояние между дыркой и ионом  $Be^{2+}$   $l = 2.76 \text{ \AA}$ , что в 1.31 раз превышает межионное расстояние  $d$  в идеальной решетке  $MgO$ . Это показывает, что ионы  $Be^{2+}$  и  $O^-$  релаксируют друг от друга. Если учесть, что для  $LiO$ - центров в кубических щелочноземельных окислах отношение  $l/d$  находится в пределах 1,2-1,4 и что ион  $Be^{2+}$  имеет малый размер, то полученный результат можно считать разумным.

Тем не менее отметить, что использованная при расчете центра формула, полученная в рамках теории возмущения второго порядка при приближении, что энергия сверхтонкого взаимодействия много больше энергии ядерного зеемановского или квадратурного взаимодействий, лишь приближенно описывает наблюдаемый спектр: во-первых, не совсем точно предсказывает положения слабых запрещенных переходов, соответствующие которым линии наблюдаются на рис.2б.

Надо обратить внимание на относительно малый (по сравнению с другим  $V$ -центрами) сдвиг  $g_2$  от значения  $g$ -фактора для свободного иона;  $\Delta g = 0.0226$ , что почти в 1,6 раз меньше, чем для  $V_{OH}$  – центра, а это значит, что во столько раз аксиальный компонент кристаллического поля для  $V_{OH-Be}$  будет больше. Следовательно, при замене иона  $Mg^{2+}$  на иона  $Be^{2+}$  катионный узел приобретает эффективный отрицательный заряд. На это указывает и высокая температурная стабильность центра (см.3б). Возможные причины: релаксация ионов кислорода вокруг маленького иона или/и ковалентные эффекты, приводящие к понижению эффективного заряда на самом ионе бериллия.



а,б – кривые ТЭЛ кристаллов  $MgO-Be$  облучения рентгеновскими лучами при 77К для интегрального свечения (I), для УФ свечения через фильтр для  $E=2,9$  эВ и 1,65 эВ  
б – кривые импульсного отжига сигналов ЭПР различных дефектов для облученных рентгеновскими лучами при 80 К кристаллов.

Рис.3

### Литература:

1. Кярнер Т.Н., Малышева А.Ф., Тажигулов Б.Т. Поиск автолокализации электронов и дырок в кристаллах MgO, MgO-Be, MgO-Ca- Труды ИФ АН ЭССР, 1984, т. 55,с.
2. Кярнер Т.Н., Долгов С.А., Тажигулов Б.Т.Люминесценция и дефекты кристаллов MgO - OH, MgO-Zn- Труды ИФ АН ЭССР, 1987, т. 61,с.