

Отметим, что учет дополнительных по сравнению с приближением Хартри—Фока членов из ряда теории возмущений приводит к тому, что $\theta_{11}(\tau')$ является уже не произведением одноэлектронных функций, а суммой таких произведений, однако это не влечет за собой дополнительных вычислительных трудностей. Поправки $\Delta E^{(1)}$ и $\Delta E^{(2)}$ представляются как вклады изображенных на рис. 2 диаграмм.

В этих диаграммах элементам рис. 3, а, б сопоставляются соответственно множители $\varphi_i \varphi_j V |\theta_{11}\rangle$ и $\langle \theta_{11} | V | \varphi_i \varphi_j \rangle$. Диаграммы для следующих членов ряда состоят из элементов рис. 3 и четверных вертексов, которым, как обычно, сопоставляются двухчастичные матричные элементы. В остальном правила составления вкладов не меняются. Обобщение техники на случай многоэлектронного атома не представляет трудностей. Переходя к расчету $\Delta E^{(2)}$, заметим, что одна из сумм по n в (3) снимается

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{n=2} \langle \theta_{11} | V | \varphi_n \Phi_n \rangle, \quad (7)$$

где

$$\Phi_n = \sum_{n_1=2} \varphi_{n_1}(\tau) \langle \varphi_{n_1} \varphi_n | V | \theta_{11} \rangle \frac{1}{E_{n_1} + E_n - 2E_1},$$

причем Φ_n удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$(h - 2E_1 + E_n) \Phi_n(\tau) = \int d\tau' \varphi_n^*(\tau) V(\tau\tau') \theta_{11}(\tau\tau') - \varphi_1(\tau) \langle \varphi_1 \varphi_n | V | \theta_{11} \rangle. \quad (8)$$

Таким образом, для вычисления $\Delta E^{(2)}$ нужно решить систему уравнений (6), (8) для ψ_1 и Φ_n , рассчитать с помощью этих функций интеграл $\langle \theta_{11} | V | \varphi_n \Phi_n \rangle$ и провести численно однократное суммирование по n .

Литература

- [1] Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова, У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 30, 385, 1971; 31, в. 4, 1971.
- [2] Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова, В. В. Толмачев. Изв. вузов, физика, 12, 84, 1969.
- [3] A. Dalgarno. Proc. Roy. Soc., 280, 258, 1964.
- [4] C. S. Sharma, C. A. Coulson. Proc. Phys. Soc., 80, 81, 1962; C. S. Sharma, R. G. Wilson. J. Phys. B1, I, 1968.
- [5] V. V. Tolmachev. Adv. in chem. Phys., 14, 1969.
- [6] Л. Н. Иванов, В. В. Толмачев. Изв. вузов, физика, 12, 89, 1968.

Поступило в Редакцию 30 октября 1970 г.

УДК 535.377 : 541.6

МЕХАНИЗМЫ ПОСЛЕСВЕЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ CsJ(Na) В ОБЛАСТИ 60—90° К

А. Н. Панова и Н. В. Ширан

Механизм термостимулированного в V_k -пике [1-3] послесвечения кристаллов подистого цезия, активированных натрием, до сих пор не рассматривался. С целью изучения этого механизма в настоящей работе были исследованы термолюминесцентные характеристики [кривые термовысвечивания (ТВ) и спектральный состав послесвечения] кристаллов подистого цезия, содержащих примесь натрия в пределах от $1.2 \cdot 10^{-4}$ до $1 \cdot 10^{-2}$ вес. %.

Предварительное облучение образцов осуществлялось рентгеновскими лучами при 60 и 80° К. При измерении кривых ТВ скорость нагрева образцов была постоянной и составляла 0.08 град./сек. Используемые в процессе работы оптические установки и методики эксперимента подробно описаны в работах [3, 4].

Из полученных кривых ТВ следует, что увеличение концентрации натрия в кристаллах CsJ в исследуемых пределах приводит к росту светосуммы, запасенной в V_k -пике (рис. 1, кривая 1), и сдвигу его максимума от 99 до 87° К (рис. 1, кривая 2). Одновременно с этим растет интенсивность пика ТВ с максимумом (T_m) 134° К, связанного, согласно [3], с делокализацией электронов с Na^0 -центров. В кристаллах, возбужденных при 60 и 80° К, сразу после прекращения возбуждения наблюдается после-

свечение, интенсивность которого медленно уменьшается во времени. Длительное хранение возбужденных кристаллов в темноте при указанных температурах приводит к уменьшению светосуммы, запасенной в V_k -пике. Если возбужденный при 60° K и выдержанный продолжительное время в темноте образец нагреть до начала разрушения V_k -пика, а затем быстро охладить, то увеличившееся при нагревании послесвечение не исчезает, как это должно было бы произойти при замораживании процесса термического разрушения центров окраски, а существует в течение значительного промежутка времени (десятки и сотни минут) (рис. 2). Спектр такого послесвечения в области 60—90° K близок к спектру примесной люминесценции кристаллов CsJ(Na) с $\lambda_{\max} = 420$ нм [5, 8].

Длительное, не зависящее от температуры послесвечение, наблюдавшееся в ряде щелочногалоидных кристаллов [4, 7, 8], является результатом прямых, или так назы-

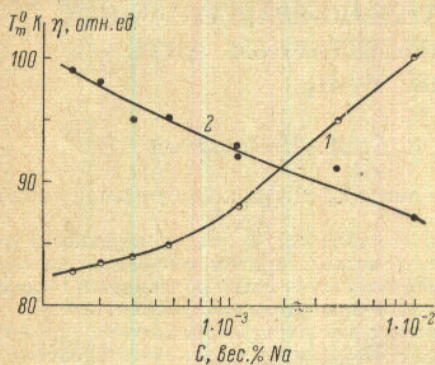


Рис. 1. Зависимость величины запасенной в V_k -пике светосуммы η (1) и температуры максимума этого пика T_m (2) от содержания натрия в кристаллах иодистого цезия.

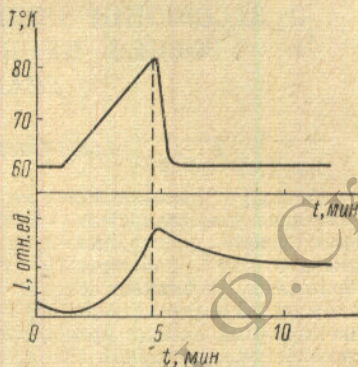


Рис. 2. Схема выделения длительного, не зависящего от температуры послесвечения кристаллов CsJ(Na) методом нагрева их до начала разрушения V_k -пика и последующего быстрого охлаждения.

ваемых «туннельных» (т. е. происходящих не через зоны) переходов между пространственно разделенными центрами окраски разного знака.

Полученные в настоящей работе результаты позволяют предположить, что в исследуемых кристаллах CsJ(Na) механизм низкотемпературного послесвечения аналогичен вышеуказанному. Спонтанно уменьшающееся во времени длительное, не зависящее от температуры послесвечение возбужденных кристаллов CsJ(Na) является результатом туннельных переходов между ближайшими дырочными (V_k -) и электронными (Na^0 -) центрами окраски. Нагревание образцов до температур, соответствующих началу разрушения V_k -пика, увеличивает подвижность V_k -центров, которые диффундируют по кристаллу, приближаясь к стабильным электронным центрам окраски, и образуют с ними взаимодействующие пары. Последующее быстрое охлаждение образцов замораживает дырки, а наблюдающееся при этом длительное послесвечение является результатом туннельных переходов между партнерами образовавшихся пар.

Низкотемпературный сдвиг V_k -пика ТВ при увеличении концентрации натрия в исследуемых кристаллах связан, по-видимому, с увеличением числа электронных (Na^0) центров окраски. При этом расстояние между взаимодействующими электронными и V_k -центрами окраски уменьшается, что приводит к росту вероятности туннельных переходов.

Совпадение спектров туннельной люминесценции со спектрами внутрицентрового примесного свечения кристаллов CsJ(Na) в области 60—90° K позволяет полагать, что конечным этапом туннельных переходов является возбуждение обусловленных наличием натрия центров люминесценции, природа которых обсуждалась ранее [6, 9].

Литература

- [1] P. Martinez, F. E. Senfite, M. Page. Phys. Rev. Lett., 12, 13, 1963.
- [2] J. Rossel, M. Aegerter. J. de Phys., 28, suppl. 8—9, C-140, 1967.
- [3] А. Н. Панова, Н. В. Ширан, Л. Ф. Шпиллинский. Сб. «Монокристаллы, сцинтилляторы и орг. люминофоры», Харьков, вып. 5, 305, 1969.
- [4] Я. Р. Боган. Канд. дисс., Рига, 1969.
- [5] А. Н. Панова, Н. В. Ширан. Изв. АН СССР, сер. физ., 31, 859, 1966.
- [6] А. Н. Панова, Н. В. Ширан. Тезисы XIX Всес. совещ. по люминесц., Рига, 1970; Н. В. Ширан. Тезисы конф. «Научно-технический прогресс в хим. и газовой промышленности», Харьков, 1970.
- [7] C. J. Delbecq, A. K. Ghosh, P. H. Yuster. Bull. Am. Phys. Soc., 6, 629, 1964; Phys. Rev., 151, 599, 1966.