

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 = & Bg^2 + (A - B)p^2 - D_j g^4 - D_{jk} g^2 p^2 - D_k p^4 + H_j g^6 + H_{jk} g^4 p^2 + H_k j g^2 p^4 + \\ & + H_k p^6 \pm \{ p^2 [\delta + \rho_j g^2 + \rho_k p^2 + \gamma_j g^4 + \gamma_{jk} g^2 p^2 + \gamma_k p^4]^2 + [q + \theta_j g^2 + \theta_k p^2] \times \\ & \times [(g^2 - p^2) - p^2]^{1/2} \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Если в добавках  $D (\varepsilon_0 - A)^{-1} F$  и  $R (\varepsilon_0 - C)^{-1} P$  в (5) ограничиться лишь основными членами и в этом приближении найти  $\varepsilon$ , то по форме оно будет полностью совпадать с (6). Поэтому можно считать, что формула (6) и есть окончательное выражение для  $\varepsilon$ . Просто в ней произведено переопределение вращательных постоянных.

Обработка вращательного спектра состояния  $\nu_8$  различных изотопических разновидностей молекулы ацетонитрила с помощью выражения (6) привела к полному согласию рассчитанных и измеренных частот линий поглощения. Найденные постоянные приведены в таблице. В качестве оценки погрешностей пара-

Постоянные изотопических модификаций молекулы ацетонитрила (МГц)

Постоянные	CH <sub>3</sub> CN	CD <sub>3</sub> CN	C <sup>13</sup> H <sub>3</sub> CN	C <sup>13</sup> D <sub>3</sub> CN
B	9226.6571 (11)	7880.2072 (38)	8960.059 (92)	7717.157 (96)
$D_j \cdot 10^2$	0.39262 (22)	0.27994 (45)	0.328 (26)	0.297 (19)
$D_{jk}$	0.178417 (24)	0.1111500 (65)	0.16938 (79)	0.10768 (27)
$H_j \cdot 10^3$	1.00 (18)	-0.71 (13)	-42 (25)	16 (13)
$H_{jk} \cdot 10^5$	0.1038 (13)	0.05885 (19)	0.11 (10)	0.083 (16)
$K_{kj} \cdot 10^5$	0.5971 (93)	0.21154 (19)	0.69 (38)	0.232 (49)
$\delta$	20282.1 (85)	17693.9 (89)	20476 (59)	18011 (40)
$\rho$	0.03321 (15)	0.035949 (59)	0.0319 (27)	0.0358 (14)
$\gamma_{kj} \cdot 10^5$	-1.109 (85)	-0.462 (22)	-1.16	-0.065
$\gamma_j \cdot 10^6$	-0.727 (85)	-0.456 (20)	1.37	-0.886
$q$	8.8993 (24)	7.0260 (18)	8.434 (29)	6.745 (23)
$\theta_j \cdot 10^4$	-0.324 (14)	-0.2259 (66)	-0.72 (39)	-0.30 (23)
$c$	0.11	0.11	0.13	0.12

метров выбрано одно стандартное отклонение. В последней строке этой таблицы указано стандартное отклонение одного измерения —  $\sigma$ .

#### Литература

- [1] О. И. Баскаков, М. В. Москвено, С. Ф. Дюбко. Ж. прикл. спектр., 23, 692, 1975.
- [2] M. L. Grenier-Besson, G. Amat. J. Mol. Spectr., 8, 22, 1962.
- [3] A. Bauer, G. Tarrago, A. Remy. J. Mol. Spectr., 53, 1 1, 1975.

Поступило в Редакцию 4 марта 1981 г.

УДК 535.52+535.341

### ОПТИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ АМОРФНЫХ СЛОЕВ CdP<sub>2</sub>

И. В. Потыкевич, В. К. Максимов, В. В. Борц и А. И. Кривутенко

Слои CdP<sub>2</sub>, толщиной 0.03—0.8 мкм для изучения оптических постоянных изготовлялись методом возгонки в вакууме порядка  $2 \cdot 10^{-5}$  тор на подложках из стекла и кристаллов кварца, мусковита, NaCl, KBr. Измерения проводились при комнатной температуре в области длин волн 0.9—10 мкм.

Для определения оптических постоянных и их дисперсии использовался метод, предложенный в работе [1], который применим для материалов с показателем преломления  $n$  намного больше коэффициента экстинкции  $k$ . На одной

спектрограмме регистрировались спектральные кривые пропускания подложки и слоев  $\text{CdP}_2$ . Последние проявляли четко выраженную интерференцию с экстремальными значениями пропускания, по величине меньшими значений коэффициента пропускания подложки. Как известно [2], это указывает на слабое поглощение в слое и на то, что показатель преломления полупроводника больше показателя преломления подложки  $n_1$ . Экстремальные значения пропускания определяются формулами [1]

$$\left. \begin{aligned} T_{\max} (c_1 + c_2 \eta)^2 &= 16n_1 n^2 \eta, \\ T_{\min} (c_1 - c_2 \eta)^2 &= 16n_1 n^2 \eta, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

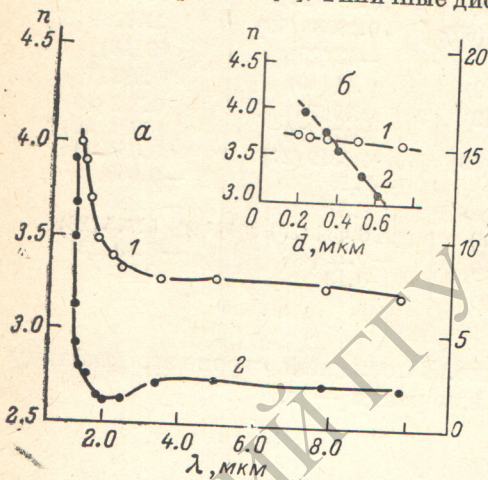
$$c_1 = (n + 1)(n_1 + n), \quad c_2 = (n - 1)(n_1 - n),$$

$$\eta = \exp\left(-\frac{4\pi k d}{\lambda}\right).$$

По значениям длин волн  $\lambda$  двух соседних экстремумов определялся интерференционный порядок  $m$ , затем зависимость  $n(\lambda)$  определялась из соотношения

$$4\pi n d = m \lambda \pi \quad (2)$$

Толщина слоев  $d$  определялась методом последовательных приближений, описанным в работе [1]. Типичные дисперсионные кривые  $n(\lambda)$  и  $k(\lambda)$  для аморфных слоев  $\text{CdP}_2$  толщиной  $\sim 0.749$  мкм приведены на рисунке, а. Как видно из рисунка, показатель преломления (см. рисунок, а, кривая 1) с увеличением длины волны убывает, т. е. вещество имеет нормальную дисперсию, а его величина зависит от рода подложки. Для слоев, полученных на таких подложках, как кристаллы кварца,  $\text{NaCl}$  и  $\text{KBr}$ , показатель преломления почти не зависит от



Зависимость коэффициента преломления и экстинкции аморфных слоев  $\text{CdP}_2$  от длины волны и толщины слоя.

рода подложки и толщины слоя (см. рисунок, б, кривая 1), тогда как для слоев, выращенных на стекле и слюде, показатель преломления с ростом толщины убывает по линейному закону.

Величина показателя преломления зависит также от температуры подложки и последующих термообработок, с ростом которых  $n$  уменьшается и стремится для толстых слоев к величинам, характерным для кристаллов  $\text{CdP}_2$  [3]. В зависимости от толщины слоев, рода подложки и термообработок значение показателя преломления аморфного дифосфида кадмия для  $\lambda = 2$  мкм лежит в интервале 3.1—4.0.

Зависимость коэффициента экстинкции  $\text{CdP}_2$  (см. рисунок,  $n$ , кривая 2) проходит через минимум, т. е. в инфракрасной области пропускание несколько уменьшается. С ростом толщины слоев коэффициент экстинкции растет, что, по-видимому, связано с уменьшением удельного объема пор, подобные закономерности наблюдались в работе [1] для аморфных слоев  $\text{Sb}_2\text{S}_3$ . Увеличение температуры подложки или последующие термообработки приводят к уменьшению величины коэффициента экстинкции. Значения  $k$ , взятые при  $\lambda = 2$  мкм в зависимости от технологии изготовления, изменяются в интервале  $(2.5-10) \cdot 10^{-2}$ .

Полученные зависимости  $n$  и  $k$  от рода подложки, толщины слоя и отжига, по-видимому, обусловлены как изменением степени однородности слоев, так и структурными превращениями в слоях. Так, при конденсации на подложке с низким коэффициентом теплопроводности происходит значительный разогрев слоев за счет поглощенной теплоты, выделяющейся при конденсации, что

вызывает отжиг и упорядочение структуры слоев. На подложках с хорошей теплопроводностью подобный отжиг происходит, по-видимому, не может. Последнее утверждение подтверждается результатами исследований фундаментального края поглощения аморфных слоев  $CdP_2$  [4], где показано, что в результате термообработки происходит сдвиг кривых поглощения в коротковолновую область.

Так как  $n \gg k$ , то диэлектрическая проницаемость  $\epsilon \approx n^2(\lambda)$  [5] и имеет ту же, что и показатель преломления, зависимость от толщины слоев, рода подложки и отжига. По величине  $\epsilon$  при  $\lambda = 2$  мкм изменяется в пределах от 9 до 16.

#### Литература

- [1] Б. А. Базакуца, В. Д. Кулибаба, В. А. Могилевский. В сб.: Вопросы физики полупроводников, вып. 1, Изд. КГУ, Калининград, 1975.
- [2] А. В. Раков. Спектрофотометрия тонкопленочных полупроводниковых структур. «Сов. радио», М., 1975.
- [3] П. И. Баранский, В. П. Клочков, И. В. Потыкевич. Полупроводниковая электроника. «Наукова думка», Киев, 1975.
- [4] И. В. Завалин, В. К. Максимов, И. В. Потыкевич. В сб.: Получение и свойства тонких пленок, Киев, 23, 1976.
- [5] В. С. Вавилов. Действие излучений на полупроводники. «Физматгиз», М., 1963.

Поступило в Редакцию 14 апреля 1981 г.

УДК 539.194.01

## О ДВУХ МЕТОДАХ РАСЧЕТА ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Ю. Б. Мальханов

Взаимодействием атомно-молекулярных систем с полем падающей световой волны обусловлен целый ряд оптических явлений, для теоретического описания которых необходимо знание тензора динамической поляризуемости  $\alpha(\omega)$  системы. В квантовомеханических расчетах динамической поляризуемости многоэлектронных систем в основном используется связанная хартри-фоковская теория возмущений (СХФ) [1-3]. Формулировка уравнений СХФ в приближении ЛКАО, впервые данная в работах [2, 3], позволила применить их не только для расчета динамической поляризуемости атомов, но и многоатомных молекул [2-4]. Неэмпирические расчеты, выполненные на основе СХФ, для поляризуемостей атомов и молекул дают значения, несколько заниженные по сравнению с экспериментальными данными. Особенно это различие велико в случае молекул (иногда оно превышает 10%) [5]. Расхождение с экспериментом объясняется тем, что в расчетах поправок в теории возмущений в рамках СХФ полностью отсутствуют корреляционные вклады. Принципиальная невозможность получения в рамках СХФ достаточно точных значений для дифференциальных характеристик многоэлектронных систем (характеристик, вычисляемых на основе теории возмущений), требует применения таких вариантов теории возмущений, которые в той или иной степени учитывают корреляционные эффекты.

Если возмущенную функцию системы представить в форме суперпозиции конфигураций, построенных из хартри-фоковских орбиталей, то можно построить теорию возмущений для многоэлектронных систем, не совпадающую с СХФ. Уравнения для неизвестных коэффициентов при конфигурациях можно получить из вариационного принципа. Впервые эта идея была выдвинута Пошлом [6], предложившим искать возмущенную функцию системы в виде суперпозиции основной (ОК) и одновозбужденных (ОВК) конфигураций. Однако при построении теории возмущений с такой функцией он использовал некоторые упрощаю-