

掺 Mg^{++} :NaF 晶体中 F_2^+ 色心的转变 及其稳定性的研究

于意仲 万良风 郭绍章

李浩

(天津大学物理系)

(天津市技术物理研究所)

我们用自己实验室生长的掺 Mg^{++} :NaF 晶体, 在液氮温度下, 经 2 MeV 的电子束辐照着色, 观察到了 F_2^+ 心向 $(F_2^+)^*$ 心的转变, 并对 $(F_2^+)^*$ 心在室温下的稳定性进行了详细的实验研究。当晶体温度从液氮升高到室温时, 观察到吸收峰为 725 nm 的 F_2^+ 心很快地衰减, 伴之而生的是吸收峰位于 850 nm 的 $(F_2^+)^*$ 心的增长, 即在 F_2^+ 和 $(F_2^+)^*$ 之间有一个转变过程, 其转变效率约为 1, 并遵守一级反应动力学规律, 这个转变过程的速率与掺杂的浓度无关, 但与掺杂的二价金属的种类有关, 由掺 Mg^{++} 和掺 Mn^{++} 的两种样品比较知, 前者的转变过程较快。

实验观察到这种被缺陷稳定了的 F_2^+ 心在室温下保存数月不退, 在加热至 80°C 以上时才出现明显的漂白作用, 其稳定性是很好的。实验测得其热漂白的激活能比纯 NaF 晶体中的 F_2^+ 心提高了约 0.4 eV 左右。

将晶体加热至 100°C 后发现位于 850 nm 的 $(F_2^+)^*$ 心转变为 568 nm 的未知心。

同时还注意到, 当用 F 吸收带的紫外光照射样品, 及加热到 150°C 后观察色心的转变, 发现在 NaF: Mg^{++} 晶体中存在着 Z_1 心(F 心和 $Mg^{++}-V_c^-$ 的复合心, 这里 V_c^- 代表阳离子空位), 其吸收峰位于 366 nm, 与由经验公式 $E_m = 15.6 R^{-1.79}$ (eV) 推得的 356 nm 相符 (R 为最近邻间距), 说明在 NaF 晶体中象 Mg^{++} 这样的杂质有构成 Z 心的可能。介电损耗测量结果也表明其 $Mg^{++}-V_c^-$ 偶极子并没有因大剂量电子束辐照而被破坏。我们在低温下电子束长时间辐照的晶体中直接观察到 Z_1 心的存在, 这与 Z 心和 F 心的比例是随辐照剂量的增加而增加的事实是一致的。

我们根据以上结果及综合有关的文献提出了一种解释, 在大剂量辐照作用下, 首先形成 F_2^+ 心, 然后在可动温度下, F_2^+ 心象 F 心和 $Mg^{++}-V_c^-$ 连接那样, 经过一系列的运动和取向与 $Mg^{++}-V_c^-$ 连接成一种稳定的结构。与 Z 心的特性相似, 其受 $Mg^{++}-V_c^-$ 扰动的结果是吸收峰向长波方向有一个不小的位移, 而热稳定性的提高也是由 $Mg^{++}-V_c^-$ 的伴随造成的。

根据上述观点, 我们对于吸收光谱的红移做了理论估算。采用沉浸在均匀无限大介质中的氢分子离子模拟 F_2^+ 心, 以及采用正负点电荷模型, 模拟二价金属杂质离子和阳离子空位进行量子力学微扰计算。结果表明 $1s_{\sigma_g} \rightarrow 2p_{\sigma_u}$ 态的跃迁能量的减少为 0.312 eV, 与实验观察到的数值 0.285 eV 基本相符。