

Локальные возбуждения в зоне проводимости кристаллического ксенона

А.Г. Белов, Е.И. Тарасова, Е.М. Юртаева

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: tarasova@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 17 марта 2003 г.

Проведено комплексное экспериментальное исследование основных характеристик излучения кристаллического ксенона с $E_{\max} = 2$ эВ (полоса А) в зависимости от температуры, концентрации примесей, совершенства структуры решетки и дозы облучения. Проведено сравнение параметров излучения этой полосы с аналогичными параметрами излучения свободных экситонов, локализованных дырок Xe_2^+ и примесных центров Xe_2O^* , полосы которых регистрировались параллельно. Проанализированы спектры фотовозбуждения полосы А и кривые затухания люминесценции во времени. Излучение с аналогичной структурой с $E_{\max} = 2,05$ эВ обнаружено также в бинарных кристаллах Ag+Xe при высоких (~10%) концентрациях ксенона. Сделан вывод, что наблюдаемое излучение обусловлено собственными возбужденными состояниями молекулярного типа, локализованными в объеме кристалла и расположенными в зоне проводимости в области энергий вблизи 10 эВ.

Проведено комплексне експериментальне дослідження основних характеристик випромінювання кристалічного ксенону з $E_{\max} = 2$ еВ (смуга А) у залежності від температури, концентрації домішок, досконалості структури ґратки і дози опромінення. Проведено порівняння параметрів цієї смуги з аналогічними параметрами випромінювання вільних екситонів, локалізованих дірок Xe_2^+ і домішкових центрів Xe_2O^* , смуги яких рееструвалися паралельно. Проаналізовано спектри фотозбудження смуги А і криві загасання люмінесценції в часі. Випромінювання з аналогічною структурою з $E_{\max} = 2,05$ еВ виявлено також у бінарних кристалах Ag+Xe при високих (~10%) концентраціях ксенону. Зроблено висновок, що випромінювання, що спостерігається, обумовлено власними збудженими станами молекулярного типу, локалізованими в об'ємі кристала і розташованими в зоні провідності в області енергій близько до 10 еВ.

PACS: 78.55.Nx, 78.60.Hk, 71.35.Cc

1. Введение

Облучение диэлектрического кристалла светом или частицами высоких энергий в зависимости от энергии возбуждающего пучка и его спектральной ширины может приводить к возбуждению как экситонов, так и свободных электронно-дырочных пар. Исследование процессов переноса и релаксации энергии, происходящих в зоне проводимости кристалла и других высокоэнергетических состояниях, необходимо для построения полной схемы каналов распределения начальной энергии возбуждения по излучающим состояниям — как собственным, так и примесным. Для кристаллов инертных элементов

проблема усложняется вследствие сосуществования свободных и автолокализованных возбуждений, причем эффект наблюдается и для экситонов, и для дырок. Возникает сложная картина ветвления процесса релаксации энергии возбуждения по состояниям свободных, автолокализованных, локализованных на дефектах и поверхностных возбуждений. Диэлектрическая щель E_g у кристаллов инертных элементов больше 9 эВ, а нижней ступенью релаксации являются экситонные состояния с энергией излучения $E > 7$ эВ, которые определяют весь квантовый выход люминесценции кристаллов в ВУФ области спектра. Излучательные переходы из нижайших свободных и локализованных экситон-

ных состояний, зависимость их характеристик от энергии возбуждения, температуры и дефектности кристалла служили тем базисом, на котором были построены многие экспериментальные исследования динамики экситонов, процессов их локализации и переноса энергии [1–3]. Особое внимание уделяется кристаллам ксенона, в которых реализуются наилучшие условия для стабильности и излучения свободных экситонов.

Вследствие большой величины резонансной связи в валентных p -состояниях в Хе реализуются самые широкие дырочные и экситонные зоны по сравнению с другими кристаллами инертных элементов. Автолокализация экситонов и дырок происходит только в двухцентровые (квазимолекулярные) состояния, имеющие большую глубину ($D_e \sim 0,5$ эВ) за счет этой резонансной связи. В последнее время развита теория смешивания состояний свободных экситонов с колебательными уровнями молекулярного автолокализованного экситона в области перекрытия экситонной зоны и локальных состояний за счет большой величины экситон-фононной связи [4,5], предложены новые критерии стабильности нижайших свободных экситонов $\Gamma(3/2)$ [6] и их автолокализации [7]. Однако чем лучше исследовались свойства нижайших экситонов, тем очевиднее становилось влияние на их излучение динамики более высокоэнергетических возбуждений и особенностей процессов релаксации энергии по пути от момента возбуждения в области более высокоэнергетических экситонов или континуума несвязанных электронно-дырочных пар до нижайших излучающих состояний. Поэтому в настоящее время акцент сместился в сторону изучения состояний возбуждений более высоких энергий. Наиболее интересным представляется вопрос, насколько существенную роль для них играет проблема сосуществования свободных и автолокализованных возбуждений. Факт возможности автолокализации дырки можно считать доказанным, но пока не известна ни доля зонных квазичастиц, способных достигнуть дна дырочной зоны, ни их вклад в процессы переноса и релаксации энергии. Для экситонов, попадающих в область энергий выше E_g , до настоящего времени известна только одна характеристика — их вклад в спектры поглощения. В Хе проблема усложняется тем, что в разряд таких возбуждений попадают все (включая и нижайшее состояние $n = 1$ с большой силой осциллятора) синглетные экситоны серии $\Gamma(1/2)$. Основной вопрос в этой ситуации — насколько стабильны эти экситонные состояния по отношению к процессу распада на свободные электроны и дырки, а также возможен ли в принципе процесс их автолокализации или локализации на

дефектах, если соответствующие локальные состояния лежат в области выше E_g .

Исследование спектров фотовозбуждения свободных экситонов в области энергий выше E_g [8,9] показало, что процесс распада начальных возбуждений на свободные электроны и дырки протекает за время, значительно меньшее времени релаксации электрона по зоне при возбуждении E_v в области больших энергий ($E_v - E_g \sim 1$ эВ). Далее дырка автолокализуется за довольно короткое время, а значительно более легкий электрон термализуется за время почти на порядок большее. Процесс рекомбинации существенно более эффективен для малых кинетических энергий электрона и в основном протекает вблизи дна зоны проводимости. Эффект проявляется в наличии долгоживущей компоненты в спектрах фотовозбуждения и в смещении по времени максимума излучения свободного экситона относительно максимума возбуждающего фотоимпульса.

Появились также данные, свидетельствующие, что вклад рекомбинационного канала в формирование как двухцентровых локальных возбуждений [10], так и свободных экситонов [8] существенным образом зависит от концентрации дефектов и примесей, которые вначале играют роль ловушек для дырок и электронов, а после рекомбинации — для свободных экситонов.

Одно из важных достижений последнего времени — исследования излучения локальных возбужденных дырочных центров в видимой области спектра [10–12]. Показано, что в кристалле возникают излучательные центры, соответствующие довольно мелкому (известно по газовой фазе) потенциалу двухцентрового иона в возбужденном состоянии Xe_2^{+*} , возникающем при локализации синглетной дырки с орбитальным моментом $J = 1/2$. Удивительными в этом факте являются два момента. Первый — это каким образом мелкий молекулярный потенциал способен трансформироваться в кристалле в устойчивое состояние, которое по энергетическим соображениям должно попасть внутрь соответствующей дырочной зоны (см., например, [2]). Второй — если все же состояние имеет выигрыш в энергии по отношению к дну своей зоны, то возникает вопрос об устойчивости возбуждения по отношению к релаксации в нижерасположенную триплетную ($J = 3/2$) дырочную зону, поскольку синглетная зона практически перекрывается с ней. Однако излучение таких центров все-таки наблюдается, и есть основания предполагать, что аналогичные эффекты могут наблюдаться и для нейтральных локальных возбуждений, попадающих в область зонных состояний.

Исследование излучения кристаллов инертных элементов в видимой области спектра имеет две важные цели. Первая (тривиальная) сводится к необходимости идентифицировать излучение примесей, чтобы контролировать их присутствие и влияние на процесс заселения собственных излучающих состояний кристалла. Вторая — это поиск возможных относительно стабильных собственных возбужденных состояний, которые лежат в более высокоэнергетичной области и могут излучать в соответствии с переходами между возбужденными состояниями. Такое исследование могло бы дать непосредственную информацию о процессах релаксации в области возбуждений более высоких энергий.

Полосы излучения нижайшего ($n = 1$) свободного экситона (FE) $\Gamma(3/2)$ в ксеноне с энергией $E_{FE} = 8,36$ эВ и квазимолекулярной полосы (M) Xe_2^* $E_M \cong 7,2$ эВ подробно исследованы во многих работах [1–3]. Диапазон состояний, соответствующий более высокоэнергетичным возбуждениям, принято считать областью быстрых безызлучательных процессов релаксации, поскольку никакого излучения в ВУФ области спектра из состояний выше $n = 1$ $\Gamma(3/2)$ не наблюдалось. Это предположение казалось особенно справедливым для ксенона, который в сравнении с другими кристаллами инертных элементов имеет большую ширину B экситонных зон $n = 1, 2, 3, \dots$ (~ 1 эВ), перекрывающихся между собой, а также с состояниями свободных электронно-дырочных пар вплоть до середины зоны проводимости (в Хе $E_g = 9,30$ эВ [13]).

Тем не менее уже при первых исследованиях люминесценции кристаллов ксенона в видимом диапазоне обнаружены две полосы собственного излучения с максимумами E_{\max} вблизи 4,0 и 2,0 эВ и с полуширинами $\Delta \approx 1,3$ и 0,08 эВ соответственно [14–16]. Было высказано предположение, что в зоне проводимости выше E_g , в области перекрытия зонных состояний, существуют достаточно долгоживущие излучательные центры. При синхротронном фотовозбуждении более совершенных кристаллов ксенона были обнаружены полосы с $E_{\max} = 4,29; 4,44$ и 2,16 эВ и $\Delta = 0,25; 0,09$ и 0,3 эВ, также отнесенные к собственному излучению кристаллического ксенона [17]. В кристаллах ксенона, выращенных методом конденсации газа из электрического разряда, исследована полоса люминесценции с $E_{\max} \approx 2,15$ эВ, $\Delta = 0,27$ эВ [13, 14].

В настоящее время высказаны предположения о природе части упомянутых выше полос излучения. Полоса с $E_{\max} \approx 4,0$ эВ в работах [14, 15] отнесена к излучательному переходу из высокоэнергетичных молекулярных состояний Xe_2^{**} на диссоциативные термы $1,3^3\Pi_u, 1,3^3\Sigma_g^+$, связанные с нижайшими воз-

бужденными состояниями $\text{Xe}^* 6s[3/2]_{1,2}$. Полосы с $E_{\max} = 4,29; 4,44$ и 2,16 эВ в работе [17] первоначально идентифицировались как рекомбинационное излучение, т.е. избыточная энергия, выделяющаяся при рекомбинации локализованных дырок и электронов при переходе в основное состояние кристалла. Однако впоследствии было показано, что полоса с $E_{\max} \approx 2,15$ эВ связана с излучением возбужденных локализованных ионных центров Xe_2^{+*} и обусловлена излучательным переходом из возбужденного ионного состояния $\text{Xe}_2^{+*} 2(1/2)_g$ (глубина потенциала в газовой фазе $D_e = 0,03$ эВ) в основное состояние $\text{Xe}_2^+ 1(1/2)_u$. В зависимости от энергии возбуждения положение максимума этой полосы изменяется в пределах 0,07 эВ. Таким образом, расхождение $\delta E_{\max} = 0,01$ эВ в [17] и [12] не является принципиально важным для ее идентификации. Повышение температуры кристалла выше 30 К приводило к дезактивации центров Xe_2^+ за счет рекомбинационных процессов с электронами, высвобождающимися из кристаллических ловушек [12].

Наибольшая трудность возникла при интерпретации полосы с $E_{\max} = 2$ эВ (полоса A). Первоначально на основании ее высокой чувствительности к наличию примесей в кристалле и совершенству структуры решетки полоса A ксенона была отнесена к переходу из свободного экситонного состояния X-типа $n = 1$, расположенного вблизи 11 эВ, в экситонное состояние Γ -типа $n = 1$ вблизи 9 эВ в точке X зоны Бриллюэна [14, 15].

Полосу A наблюдали и при фотовозбуждении ксенона синхротронным излучением в работах [17, 18], но никакого объяснения или альтернативной интерпретации ее происхождения авторы не привели. Отметим, что при синхротронном возбуждении интенсивность этой полосы была невелика, и она слабо выделялась на фоне соседней более широкой полосы с $E_{\max} = 2,16$ эВ, а при лазерном фотовозбуждении замороженных ионных центров Xe_2^+ полоса A вообще не наблюдалась [11, 12].

С целью выяснения происхождения полосы A были предприняты первые попытки измерения спектра возбуждения, проведенные с помощью синхротронного источника ВУФ излучения [16]. Однако недостаточно хорошее спектральное разрешение и существенное перекрытие этой полосы с соседними не позволили сделать однозначные выводы о ее происхождении. Спектр фотовозбуждения полосы ксенона с $E_{\max} = 2$ эВ при более хорошем спектральном разрешении получен в работе [18]. Кроме высокоэнергетичной части выше дна зоны проводимости E_g , в спектре обнаружена также существенная составляющая в области экситонов $n = 1$ $\Gamma(3/2)$, т.е. на 1 эВ ниже E_g . Наличие этого участка вызвало со-

мнение в корректности первоначального отнесения полосы A ($E_{\max} = 2,0$ эВ) к переходу из высокоэнергетичных свободных экситонов с энергией ~ 11 эВ.

Таким образом, имеющихся в настоящее время сведений явно недостаточно для выяснения происхождения излучения с $E_{\max} = 2,0$ эВ. Мы решили применить комплексный подход и предпринять ряд дополнительных разносторонних и систематических исследований, которые помогли бы установить природу полосы A в излучении ксенона. Прежде всего следовало исключить простейшее предположение, логически вытекающее из факта ее возбуждения нижайшими экситонами, — это захват экситона примесью и излучение из нижерасположенного примесного состояния. Исходный газ ксенона с этой целью был дополнительно очищен. Далее был поставлен вопрос, принадлежит ли полоса A к излучению из поверхностных или объемных состояний, а также являются ли излучающие состояния свободными или локальными возбуждениями. Решающее значение при решении этой проблемы имела зависимость интенсивности излучения от качества кристаллической структуры, дозы облучения и температуры кристалла. Также было проведено исследование излучения примеси Хе в матрице другого инертного газа, поскольку интенсивность свободных экситонов чрезвычайно чувствительна к введению примеси. Следующим важным моментом является вопрос о связи излучающего состояния с зарядовыми или нейтральными состояниями. Поэтому в данной работе проведен сравнительный анализ поведения полосы излучения с $E_{\max} = 2,0$ эВ и люминесценции автолокализованных дырок Xe_2^{+*} ($E_{\max} = 2,15$ эВ) в зависимости от перечисленных выше параметров. Кроме того, нами впервые получены спектры затухания люминесценции полосы A со временем для трех существенно различных энергий возбуждающего импульса. В сочетании с анализом полученных ранее спектров фотовозбуждения эти исследования позволили отнести излучение с $E_{\max} = 2,0$ эВ к собственному объемному нейтральному локализованному состоянию молекулярного типа, формирующемуся внутри нижайшей зоны проводимости кристалла ксенона.

2. Методика эксперимента

Люминесценция чистых кристаллов Хе, а также кристаллов Аг с примесью ксенона исследована при возбуждении образцов монохроматическими электронами с энергией $E_e \simeq 2$ кэВ. Плотность тока j составляла $0,04$ мА/см². Направление потока элект-

тронов совпадало с нормалью к поверхности образца.

Исходный номинально чистый газообразный ксенон содержал остаточные примеси с концентрацией $C_i \sim 10^{-3}\%$ в соответствии с паспортными данными. После предварительной очистки в специальной установке с использованием жидкого лития при $T = 200$ °С чистота исходного газа улучшилась более чем на порядок величины и составляла $C_i < 10^{-4}\%$. Для экспериментов использовали как номинально чистый газ ксенона с концентрацией примеси $C_i \sim 10^{-3}\%$, так и дополнительно очищенный Хе. Для выращивания и оптического исследования кристаллов использован проточный гелиевый криостат с регулируемой температурой подложки в диапазоне от 2,5 до 78 К. Кристаллы выращивали методом напыления из газовой фазы при температурах конденсации $T_c = 5, 35$ или 80 К, а затем медленно охлаждали до более низких температур. Полученные поликристаллы имели толщину ~ 1 мкм и оптически были совершенно прозрачны. Кристаллы наилучшего качества получались при конденсации предварительно очищенного газа на подложку при $T = 80$ К. Качество кристалла контролировали по интенсивности и форме полосы люминесценции свободного экситона $\Gamma(3/2)$. Кристаллы аргона с примесью ксенона при концентрации $C_{\text{Хе}} = 1\%$ и 10% выращивали при 30 К. Рабочий вакуум в криостате поддерживался на уровне 10^{-10} бар. Регистрацию излучения под углом $\pm 45^\circ$ осуществляли одновременно в видимой и ВУФ областях спектра с помощью спектральных приборов ДФС-24 и ВМР-2. Спектральное разрешение составляло 0,015 и 0,05 нм для видимой и ВУФ областей соответственно. Более подробно методика люминесцентных исследований описана в [19].

Условия эксперимента по фотовозбуждению кристаллов Хе на синхротроне С-60 были следующими. Поликристаллы Хе выращивали при 65 К и экспонировали при той же температуре. Спектр возбуждающего СИ сканировался в диапазоне от 25 до 5 эВ с разрешением 0,5 эВ. Временной интервал между максимумами световых импульсов составлял 49 нс, а полуширина импульса — 8 нс. Исследуемый спектральный интервал люминесценции выделялся с помощью интерференционных светофильтров ИФ-625 ($E_{\max} = 2$ эВ), ИФ-550 ($E_{\max} = 2,25$ эВ) и ИФ-500 ($E_{\max} = 2,5$ эВ). Практическая область пропускания светофильтров составляла 0,05 эВ. Более подробное описание установки для оптических исследований на С-60 приведено в [20].

3. Результаты эксперимента

3.1. Люминесценция кристаллов Хе

В видимой области спектра люминесценции кристаллического ксенона, выращенного из очищенного газа, представляет собой две частично перекрывающиеся полосы *A* и *B* с максимумами $E_{\max} = 2,0$ и $2,15$ эВ и полуширинами $\Delta = 0,055$ и $0,26$ эВ соответственно. Полосы *A* и *B* расположены в непосредственной близости друг к другу, но благодаря различной ширине имеют хорошо разделенные контуры, что позволяет воспроизвести их спектральное распределение в области перекрытия. Положение максимума полосы *B* с точностью до $0,01$ эВ совпадает с максимумом полосы излучения ионов Xe_2^+ в кристаллической матрице $2(1/2)_g \rightarrow 1(1/2)_u$ ($E_{\max} = 2,147$ эВ), который был получен в [1] при возбуждении фотонами с энергией $E_\nu = 3,72$ эВ. Зависимости интенсивностей полос *A* и *B*, положения их максимумов и полуширин от структуры кристалла, концентрации примесей, температуры и длительности облучения имеют различный характер.

Чувствительность спектра к концентрации примеси. На рис. 1 представлены спектры излучения кристаллов ксенона при различной степени очистки исходного газа. Спектральным индикатором присутствия примесей может служить достаточно хорошо известная полоса вблизи $1,7$ эВ, принадлежащая эксимерным соединениям XeO^* и Xe_2O^* в матрице Хе (см., например, [21]). В излучении очищенных образцов полоса вблизи $1,7$ эВ полностью отсутствует. Полоса *A* не наблюдалась в образцах,

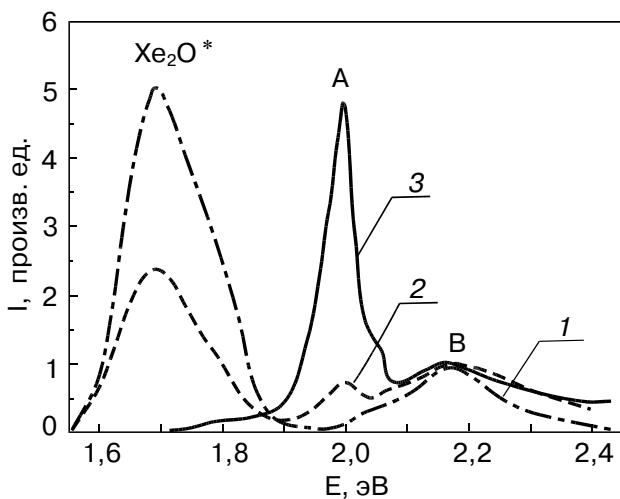


Рис. 1. Спектры люминесценции Хе в зависимости от концентрации примесей в исходном газе: 1 – неочищенный Хе ($C_i \approx 10^{-3}$ ат. %), 2 – очищенный Хе ($C_i < 10^{-4}$ ат. %) и 3 – смесь этих газов в пропорции 1:100. $T = 5$ К. Спектры нормированы в максимуме интенсивности полосы *B*.

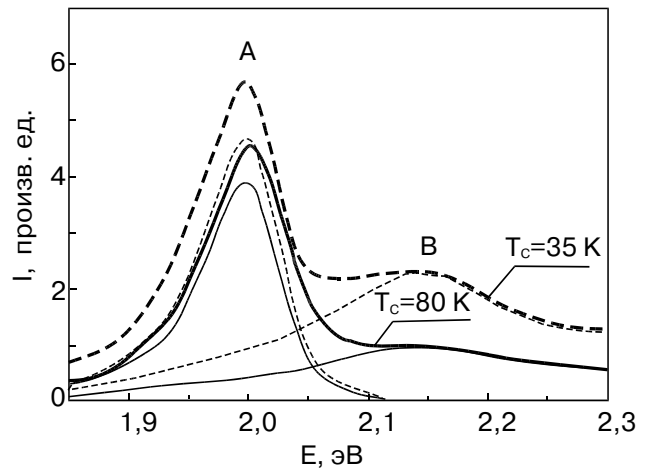


Рис. 2. Спектры излучения образцов, выращенных из очищенного ксенона при различных температурах конденсации. Спектры представлены как суперпозиция компонент *A* и *B*.

выращенных из неочищенного газа. В спектрах излучения наиболее совершенных кристаллов из очищенного ксенона интенсивность полосы *A* намного выше, чем полосы *B*. В промежуточном случае, при недостаточной очистке исходного газа, полоса *A* имеет слабую интенсивность и проявляется в виде небольшого пика на низкоэнергетичном крае полосы *B*.

Влияние дефектности кристалла на спектр люминесценции контролировалось двумя параметрами: температурой выращивания кристалла T_c и длительностью его облучения электронами t_i . Первый параметр определяет нарушения структуры решетки (наличие дефектов упаковки), образующиеся при выращивании кристалла. При понижении температуры конденсации размеры монокристаллических зерен уменьшаются, суммарная протяженность границ зерен увеличивается. Второй параметр определяет генерацию точечных радиационных дефектов, концентрация которых растет с увеличением времени облучения. На рис. 2 приведены спектры кристаллов, выращенных из очищенного газа при температурах конденсации $T_c = 35$ и 80 К. Соотношение интенсивностей полос *A* и *B* (I_A/I_B) увеличивается с ростом температуры конденсации приблизительно в 2 раза. В спектрах люминесценции кристаллов, выращенных при температурах $T_c < 30$ К, полоса *A* практически отсутствует; интенсивность полосы *B* также уменьшается, но она все же наблюдается. Таким образом, можно сделать вывод, что полоса *A* более чувствительна к размерам монокристаллических зерен, чем полоса *B*.

На рис. 3,а показано изменение спектра излучения полос *A* и *B* при увеличении времени облучения t_i и, соответственно, увеличении концентрации ра-

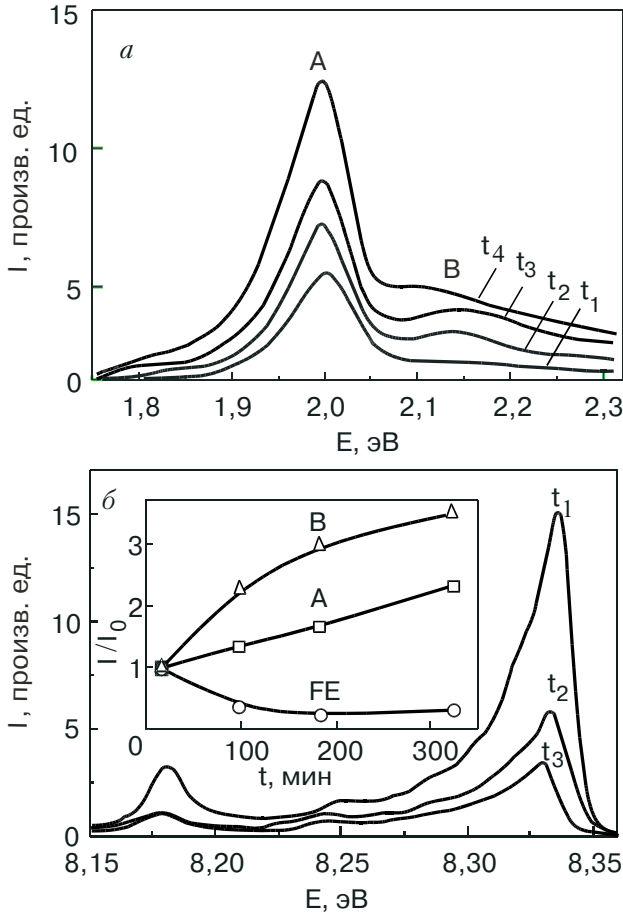


Рис. 3. Изменения спектра люминесценции кристаллического Хе в зависимости от дозы облучения электронами. $T_c = 80$ К, $T = 5$ К, $I_e = 13$ мкА, $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$. а – видимая область, б – ВУФ область, спектр свободного экситона $\Gamma(3/2)$. На вставке – интенсивности полос I_A , I_B и I_{FE} , нормированные в начальной точке измерений t_1 . Спектры А, В и FE регистрировались одновременно.

диационных дефектов. Дозы облучения $N_e(t)$ приблизительно соответствуют $N_e(t_1) = 4 \cdot 10^8$, $N_e(t_2) = 2 \cdot 10^9$, $N_e(t_3) = 4 \cdot 10^9$, $N_e(t_4) = 8 \cdot 10^9$ электронов с энергией $E_e = 2$ кэВ. Интенсивность полос А и В увеличивается со временем t_i . Интенсивность спектра излучения свободного экситона изменяется в противоположном направлении (рис. 3,б). На начальной стадии облучения I_{FE} быстро уменьшается и принимает наименьшее значение при $t_i > 200$ мин. Ход дозовых зависимостей интенсивностей полос I_{FE} , I_A и I_B показан на вставке рис. 3,б.

Температурные изменения спектра объединенного контура полос А и В имеют достаточно сложную конфигурацию. Для того чтобы определить поведение каждой полосы, было проведено их спектральное разделение с использованием в качестве репера формы полосы в таких спектрах, где влияние близлежащих полос минимально. Форма

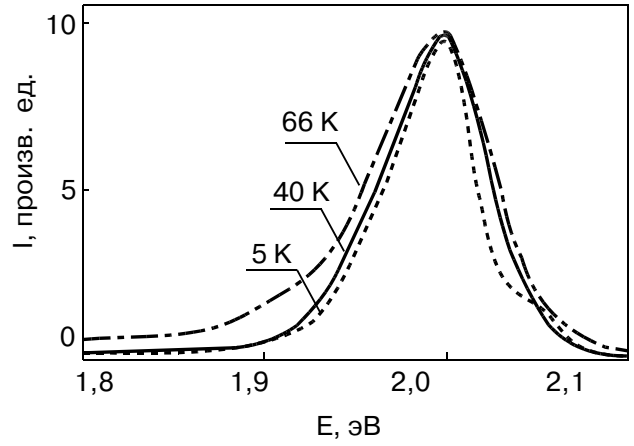


Рис. 4. Форма полосы А при различных температурах, интенсивности нормированы в точке максимума.

полосы А выделена из спектра наиболее совершенного кристалла с минимальным количеством примесей, а форма полосы В – из спектра кристалла с небольшой концентрацией примеси, соответствующей кривой 3 на рис. 1. Результат выделения полосы А приведен на рис. 4. Для наглядности изменения формы полосы спектры нормированы в точке максимума. Положение максимума полосы А практически не изменяется во всем исследованном температурном интервале, а полуширина уменьшается при понижении температуры от $\Delta_A = 0,079$ эВ при $T = 66$ К до $\Delta_A = 0,052$ эВ при $T = 5$ К.

Температурные зависимости интенсивностей полос А, В и свободного экситона приведены на рис. 5. При понижении температуры от 66 до 5 К интенсивность $I_A(T)$ увеличивается почти вдвое. В интервале от 20 до 50 К зависимость $I_A(T)$ более пологая, чем при низких и высоких температурах. При $T \approx 40$ К в зависимости $I_B(T)$ наблюдается максимум (заметим, что при этой температуре в спектре термолюминесценции обнаружен максимум [22]). В боль-

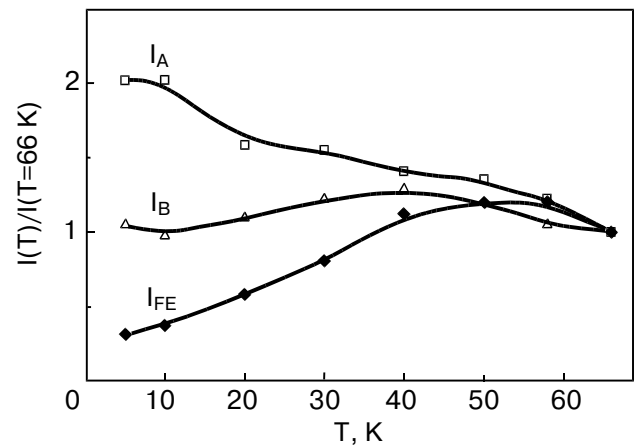


Рис. 5. Температурная зависимость интенсивностей полос излучения ксенона. Нормировка в начальной точке при 66 К.

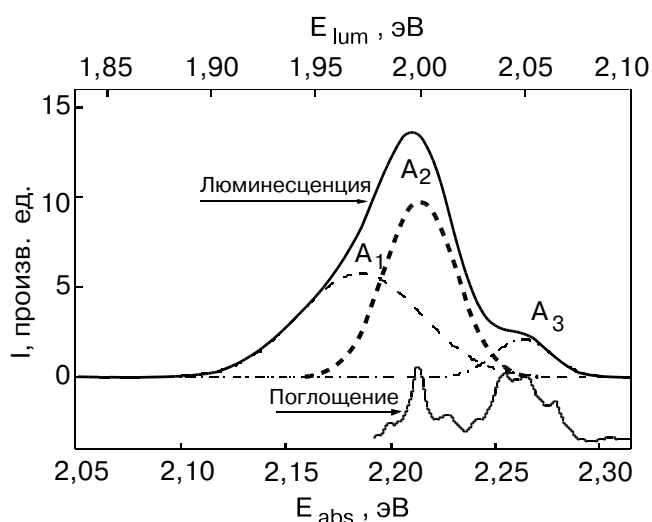


Рис. 6. Представление формы полосы A как суперпозиции трех отдельных полос гауссовой формы (верхняя шкала энергий). Спектр нестационарного поглощения газообразного ксенона из состояний Xe_2^* ($100_u^-/6s^3P_2$; $(1)1_u/6s^3P_2$ и $(1)0_u^+/6s^3P_1$ в состояния $(9)1_g$, $(10)1_g$, $(11)1_g$, $(4)2_g$ и $(7)0_g^-$ [34] для удобства сравнения смещен в область меньших энергий на 0,215 эВ (нижняя шкала энергий).

шей части температурного интервала — вплоть до 60 К — в поведении полосы A и свободного экситона наблюдается практически антикорреляция, в то время как зависимость полосы B имеет слабо выраженный промежуточный характер.

Форма полосы A достаточно хорошо описывается суперпозицией трех более узких гауссовских компонент A_1 , A_2 и A_3 с $E_{\max} = 1,97$; 2,0 и 2,05 эВ (см. рис. 6). Наиболее высокоэнергетичная слабая компонента A_3 явно проявляется только при низких температурах. При повышении температуры отмечается уменьшение относительной интенсивности полос $I(A_1)/I(A_2)$, а также уширение обеих полос. Параметры полос A_1 и A_2 в зависимости от температуры приведены в таблице.

Таблица

Структура полосы A и изменение параметров ее компонент в зависимости от температуры кристалла

T , К	A_1		A_2		$I(A_1)/I(A_2)$
	E_{\max} , эВ	Δ , эВ	E_{\max} , эВ	Δ , эВ	
5	1,971	0,058	2,0	0,033	0,58
40	1,963	0,068	2,0	0,049	0,35
66	1,957	0,122	2,0	0,054	0,36

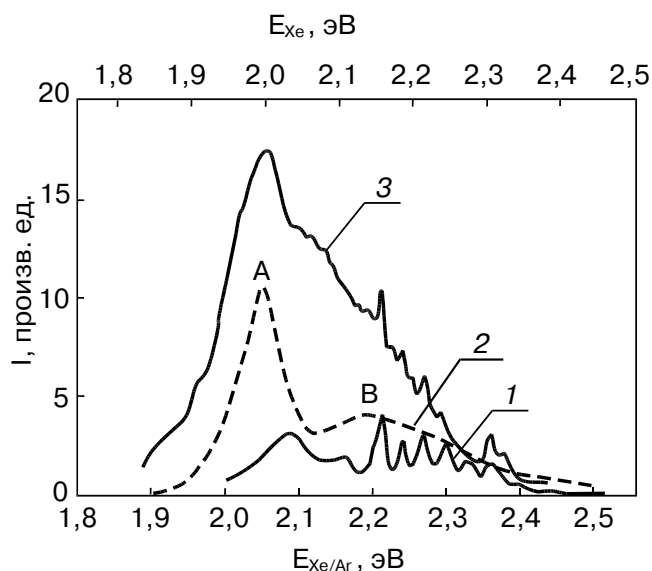


Рис. 7. Спектр люминесценции Xe в Ag, $C_{\text{Xe}} = 1\%$ (1) и $C_{\text{Xe}} = 10\%$ (3). Серия узких полос в области 2,2–2,3 эВ — люминесценция XeO^* от остаточной примеси кислорода в аргоне. Для сравнения приведен спектр полос A и B , наблюдаемый в чистом ксеноне (верхняя шкала энергий), со сдвигом в область больших энергий на 0,05 эВ (2).

Эти данные согласуются с информацией о наличии двух полос с максимумами $E_{\max} = 1,98$ и 2,0 эВ и полуширинами $\Delta = 0,08$ и 0,05 эВ, приведенной в работе [18].

3.2. Люминесценция кристаллов Ag с примесью Xe

Спектр люминесценции примесного излучения Xe в матрице Ag при концентрациях $C_{\text{Xe}} = 1$ и 10% представлен на рис. 7. Здесь же приведен спектр излучения полос A и B в чистом Xe при достаточно длительном облучении. Анализ спектров на рис. 7 дает основания считать, что при достаточно высоких концентрациях ($C_{\text{Xe}} \cong 10\%$) суперпозиция полос A и B составляет основную часть примесного спектра излучения.

3.3. Спектры возбуждения и кривые затухания люминесценции

Спектры фотовозбуждения полосы A представлены на рис. 8. На рис. 8,а приведены данные других авторов, необходимые для сравнительного анализа. Верхний спектр [23] указывает, какие состояния поглощают свет (обозначения сверху), а также объясняет ряд минимумов в спектрах возбуждения эффектом антикорреляции, поскольку в области пиков резонансного поглощения наблюдаются максимумы отражения, за счет чего эффективность возбуждения падает. Отметим, что недавно получены спектры фотовозбуждения полосы излучения M_1

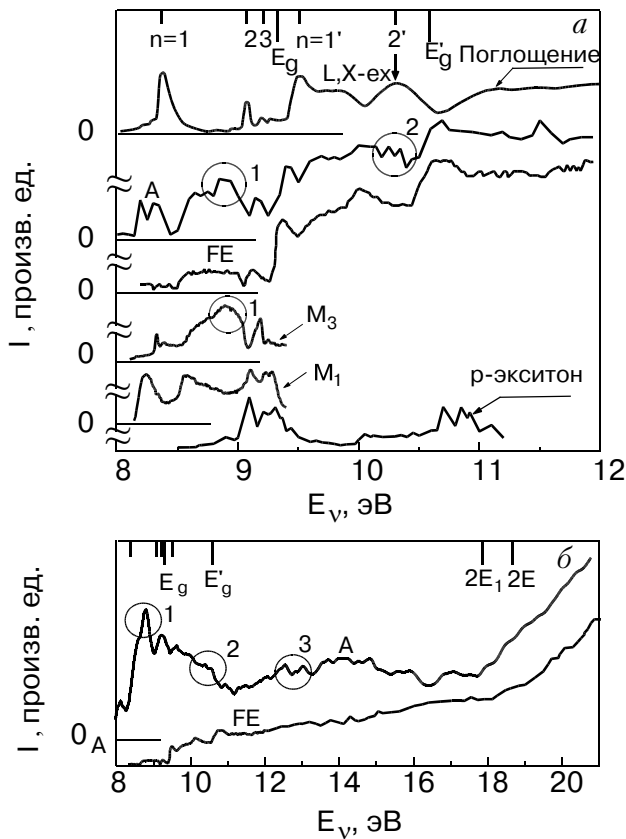


Рис. 8. Спектры ксенона. (а) Кривые сверху вниз: спектр поглощения [40], в верхней части отмечено положение дна экситонных зон $n = 1, 2, 3 \Gamma(3/2), (1/2)$ и зон проводимости E_g, E'_g . А — спектр возбуждения полосы А при $T = 5 \text{ К}$ [18], кругами с номерами отмечены пики, не имеющие аналогов на кривой FE. FE — спектр возбуждения свободного экситона $\Gamma(3/2)$, зарегистрированный во временном окне длительностью $\tau = 49 \text{ нс}$ при $T = 5 \text{ К}$ [18]. M_1 — спектр возбуждения полосы локализованных на дефектах двухцентровых экситонов Xe_2^* с $E_{\text{max}} = 7,15 \text{ эВ}$, M_3 — спектр возбуждения полосы $E_{\text{max}} = 7,6 \text{ эВ}$, оба спектра сняты при $T = 60 \text{ К}$ [24]. p -экситоны — спектр возбуждения полосы М при $T = 158 \text{ К}$ [25], особенности приписываются p -экситонам. (б) А — спектр возбуждения полосы А, полученный нами на С-60 при $T = 60 \text{ К}$, FE — спектр возбуждения свободных экситонов [18].

(7,05 эВ) нижайшего экситона Xe_2^{+*} , локализованного на дефекте, и полосы M_3 (7,6 эВ) при температуре 60 К, когда полоса M_3 доминирует в спектре квазимолекулярного излучения [24]. Последним на рис. 8,а приведен спектр двухфотонного возбуждения полосы М, где проявились запрещенные в одnofотонном режиме переходы [25]. На рис. 8,б приведен полный спектр возбуждения полосы А, полученный нами на синхротроне С-60 при $T = 60 \text{ К}$, и спектр фотовозбуждения свободного экситона [18].

В области ниже дна зоны проводимости E_g наблюдается явное сходство спектров возбуждения полосы А и квазимолекулярной полосы М. Спектр возбуждения полосы А [18] при $E_1 = 8,9 \text{ эВ} \sim E_{\text{ex}}(n = 2)$ имеет особенность (обозначена на рисунке цифрой 1), которая практически совпадает с поведением в этой области высокотемпературной компоненты M_3 , ранее приписанной к излучению из трехатомных квазимолекулярных комплексов [26]. В области резонанса экситона $\Gamma(3/2) n = 1$ спектр [18] больше напоминает возбуждение обычной (суммарной $M_1 + M_2$) полосы М автолокализованного экситона Xe_2^* . Заметим, что в работе [18] измерения проведены при $T = 5 \text{ К}$, а на рис. 8,б спектр приведен при 60 К. Особенность «1» в нашем спектре проявилась намного сильнее, а резонанс $n = 1$ — слабее, и в целом полученный нами спектр почти полностью совпадает со спектром возбуждения M_3 при 60 К. Выше E_g наблюдается хорошее совпадение структуры спектров возбуждения полосы А [18] и свободного экситона, зарегистрированного в течение 49 нс после импульса возбуждения [8], причем обе зависимости в основном отражают характер спектра поглощения. Спектр А отличается наличием особенности «2» ($E_2 \approx 10,3 \text{ эВ}$) в области поглощения экситонов, порождаемых электронами и дырками, состояния которых близки к крайним точкам L и X зоны Бриллюэна [27]. На спектре поглощения соответствующую очень интенсивную полосу мы обозначили как L,X-экситоны. Эта же особенность наблюдается и в спектре возбуждения полосы А (рис 8,б). Выше 12 эВ наблюдается некоторое сходство спектров возбуждения полос А и FE. Следует отметить особенность «3» ($E_3 \approx 13 \text{ эВ}$) в спектре полосы А, которая по энергии примерно соответствует межзонному переходу $X_6^- \rightarrow X_7^+$. В высокоэнергетической части наблюдается значительный рост интенсивности (порог в области около 18 эВ), который, учитывая особенность $E_1 = 8,9 \text{ эВ}$, можно объяснить увеличением вероятности возбуждения двух экситонов с энергией E_1 .

Измерение времени жизни полосы А проведено на синхротроне С-60 с энергиями фотонов $E_v = 9, 13$ и 21 эВ , которые соответствуют особенностям «1», «3» и максимальной энергии спектра на рис. 8,б. Кривые затухания люминесценции во времени приведены на рис. 9. Две верхние кривые соответствуют возбуждению фотонами с энергией $E_v = 21 \text{ эВ}$ и $E_v = 9 \text{ эВ}$. Особенностью этих кривых затухания является смещение со временем максимума кривой затухания излучения относительно максимума возбуждающего фотоимпульса, что характерно для каскадного процесса. Простейшая схема каскадного

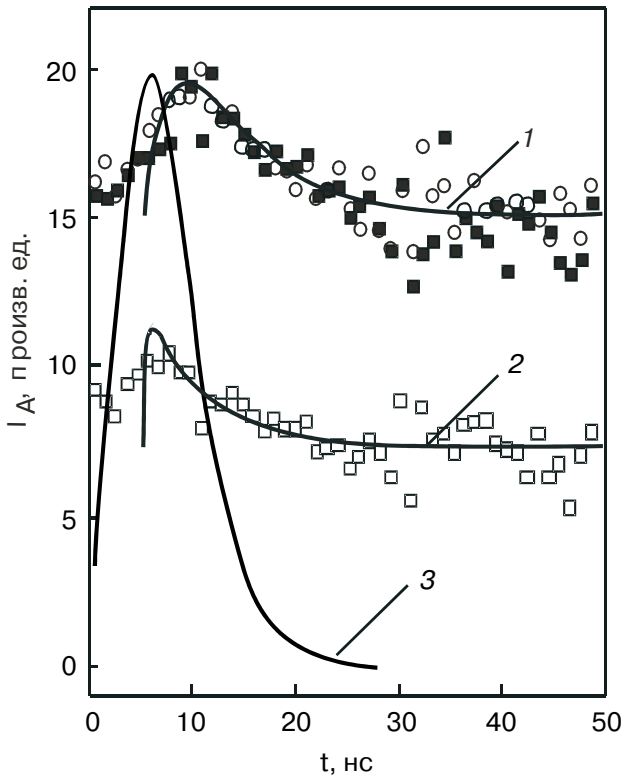


Рис. 9. Зависимость интенсивности полосы A от времени после импульсного возбуждения: 1 — энергия возбуждения $E_v = 21$ и 9 эВ (светлые и темные точки соответственно), 2 — $E_v = 13$ эВ, 3 — форма возбуждающего светового импульса. Для лучшего сопоставления экспериментальная кривая 2 смещена вниз относительно кривой 1. Сплошные кривые 1 и 2 — расчет в модели (1).

процесса изменения числа частиц со временем описывается уравнениями

$$\frac{dn_0(t)}{dt} = I_0(t) - \frac{n_0(t)}{\tau_0}; \quad \frac{dn_A(t)}{dt} = \frac{n_0(t)}{\tau_0} - \frac{n_A(t)}{\tau_A}, \quad (1)$$

где $I_0(t) = I_0\delta(t - t_0)$ — импульс возбуждения (у нас $t_0 = 5$ нс соответствует максимуму импульса возбуждения, кривая 3 на рис. 9). В таком процессе первичные центры с концентрацией $n_0(t)$ за время жизни τ_0 переходят в излучающие центры с концентрацией $n_A(t)$ и временем жизни τ_A . При этом считается, что интенсивность полосы A $I_A(t) = \tau_A^{-1}n_A(t)$. Решение системы уравнений (1) представлено на рис. 9 в виде кривой 1 с параметрами $\tau_0 = 3$ нс, $\tau_A = 6$ нс. Большой фон при периоде возбуждения 48 нс (в масштабе рисунка — 15 ед.) объясняется наличием долгоживущей компоненты излучения, время которой может быть оценено как $\tau_A^I \sim 200$ нс. Расхождение рассчитанной кривой и экспериментальных точек на начальном участке объясняется большой реальной шириной возбуж-

дающего импульса. Расчетное смещение максимума кривой относительно начального импульса ($t = 5$ нс) $\Delta t \cong 4$ нс. Аналогичное смещение наблюдалось на кривых затухания люминесценции свободного экситона при возбуждении его фотонами с энергией $E_v > (E_g + 0,5)$ эВ [9]. Задержка объясняется тем, что при увеличении энергии возбуждения увеличивается время релаксации электрона на дно зоны проводимости в процессе однофононного рассеяния.

Смещение максимума кривой 2 на рис. 9, полученной при энергии возбуждения $E_v = 13$ эВ, не наблюдается, что соответствует $\tau_0 \ll 3$ нс (в расчете использовано $\tau_0 = 0,3$ нс), при этом значение времени жизни $\tau_A = 6$ нс не изменилось. Короткое время заселения проявляется в том, что форма кривой 2 на начальном этапе практически повторяет форму кривой 3 возбуждающего импульса.

Тот факт, что при понижении энергии возбуждения до 9 эВ максимум на кривой затухания снова сдвигается, свидетельствует о существовании некоторых промежуточных процессов задержки при возбуждении в экситонной области E_1 .

4. Обсуждение

4.1. Общая характеристика излучающих состояний

С целью выяснения природы происхождения полосы излучения A с $E_{\max} = 2$ эВ проанализируем полученные результаты, сравнивая ее зависимости от различных параметров с аналогичными для надежно идентифицированных полос излучения — примесных центров XeO^* , свободных экситонов, молекулярных возбужденных центров Xe_2^* и ионных возбуждений Xe_2^{+*} .

Прежде всего, резкое возрастание интенсивности излучения полосы A одновременно с тушением примесной полосы XeO^* после дополнительной очистки исходного газа ксенона определенно опровергает версию о примесном характере излучающих состояний.

Сразу можно отвергнуть версию о поверхностном характере A -состояний в соответствии со следующими тремя фактами. Во-первых, при выращивании мелкогранулированных образцов, когда суммарная поверхность увеличивается, интенсивность полосы A падает (при $T_c < 35$ К) практически до нуля. Во-вторых, спектр фотовозбуждения имеет так называемый инверсный характер (антикорреляция со спектром поглощения). Это означает, что области энергий с меньшим коэффициентом поглощения («крылья» резонансной полосы поглощения) соответствуют большей глубине проникновения света в

кристалл и более эффективному возбуждению объемных экситонов. В-третьих, наблюдается аналогичное довольно интенсивное излучение примесных состояний Хе в матрице Аг, где при концентрациях $C_{\text{Хе}} = 10\%$ доля поверхностных состояний атомов (молекул) ксенона становится значительно меньшей. Таким образом, следует идентифицировать полосу А как излучение объемных собственных состояний.

Обсудим, может ли полоса А быть вызвана переходом из состояний свободных (зонных) экситонов более высоких энергий в зону нижайшего $n = 1$ Г(3/2) дипольно активного экситона. Полоса излучения с энергией 2 эВ должна соответствовать переходам из экситонных состояний, расположенных существенно выше дна зоны проводимости $E_g = 9,3$ эВ (их называют резонансными). Согласно общей теории [28], экситонные состояния в области непрерывного спектра не являются связанными в обычном смысле, они характеризуются мнимой энергией $E - i\Gamma$, где Γ описывает вероятность процесса распада экситона на свободные заряды, а их волновая функция имеет вид волны, амплитуда которой расходуется на бесконечности. Относительная стабильность этих состояний может обеспечиваться разной симметрией волновых функций экситонного электрона (или дырки) и свободного. Экситоны серии Г(1/2) отличаются состоянием дырки (нижайшая зона проводимости соответствует триплетной дырке с $J = 3/2$), а Х, L-экситоны — изменением конфигурации электронной зонной волновой функции при подходе к краю зоны. Взаимодействие с дефектами может приводить либо к локализации экситона на дефекте, либо стимулировать распад экситона на свободные заряды. В любом случае оно приводит к быстрому тушению свободных экситонов (так же, как это происходит с полосой FE на рис. 3) и, следовательно, разгоранию излучения из локализованных состояний. Увеличение интенсивности излучения полосы А с повышением дозы облучения, т.е. с увеличением концентрации точечных дефектов, явно соответствует локальному характеру возбуждения. С другой стороны, в примесных системах ($C_{\text{Хе}} \sim 10\%$) интенсивность полосы А увеличивается, а свободные экситоны ксенона не могут существовать, поскольку отсутствует трансляционная симметрия. Таким образом, следует признать, что возбуждение, ответственное за излучение полосы А, является локальным.

Следующий вопрос — может ли полоса А соответствовать излучению возбужденного ионного центра. Близость ее по энергии с полосой В, соответствующей возбуждению Хе_2^{+*} , прежде всего наводит на мысль о возможно близкой природе их происхо-

ждения, однако наши данные показывают, что поведение этих полос различно. Интенсивность полосы В в зависимости от дозы облучения за характерное время ~ 300 мин выходит на насыщение. В экспериментах по исследованию фотопроводимости за счет ионизации экситонов в криптоне [29], где было показано накопление зарядов на поверхности кристалла, характерное время было ~ 100 мин. Эффект насыщения роста фототока был приписан электростатическому пределу накопления зарядовых центров в образце. Увеличение времени насыщения кристалла ионными центрами в нашем случае связано со спецификой возбуждения кристалла пучком электронов. В отличие от полосы В интенсивность полосы А не достигает насыщения за время регистрации, что свидетельствует об отсутствии заряда на А-центре. Кроме того, как уже упоминалось, в экспериментах на образцах со специально созданной высокой концентрацией ионных центров наблюдалось эффективное возбуждение полосы В светом с энергией 4,5 эВ, но при этом излучение полосы А полностью отсутствовало [11,12]. Эти факты убеждают, что полоса А принадлежит нейтральному центру излучения.

Рассмотрим следующий вариант происхождения наблюдаемой полосы: полоса А обусловлена избыточной энергией, выделяющейся при рекомбинации локализованных электронов и дырок. При этом происходит переход в основное состояние кристалла. Эта трактовка предложена в [17] для ряда полос в видимой области излучения с энергиями $\sim 3-4$ эВ. Энергия, выделяющаяся при рекомбинации, описывается уравнением

$$E(r) = E_g - (E_h + E_e) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{r} - \Delta V_L, \quad (2)$$

где $E_h \approx 0,6$ эВ — глубина автолокализованной дырки; E_e — энергия связи электрона в ловушке; r — расстояние между электроном и ионом; $\epsilon_r = 2,2$ — диэлектрическая константа твердого Хе; e — заряд электрона; ΔV_L — разница энергий решетки в возбужденном и основном состояниях с учетом вклада дырочного и электронного центров. Заметим, что в работе [17] использовано уравнение, в котором третий член в (2) взят с противоположным знаком — по аналогии с известными эффектами рекомбинации в полупроводниках [30]. Однако в полупроводниках возбужденное состояние — это заполненные (нейтральные) состояния дырочных и электронных ловушек, а основное состояние — опустошенные (заряженные) акцепторные и донорные центры. В случае рекомбинации локальной дырки и локального электрона кулоновская связь существует в возбужденном состоянии (локальный

аналог экситона), а основное содержит нейтральные атомы, что и дает соответствующий знак кулоновской энергии в (2).

Формирование локальных зарядовых центров в кристаллах инертных элементов может быть связано с существенной деформацией решетки. Дырочный двухцентровый ион состоит из двух близкорасположенных атомов, энергия отталкивания которых в основном состоянии дает для Хе $\Delta V_L \approx 0,8$ эВ [31]. Экспериментальных данных о реально существующих электронных ловушках пока явно недостаточно. В мелких ловушках типа поры (большого скопления вакансий) отталкивание электрона от ближайшего окружения практически компенсируется поляризационным притяжением. Глубокие ловушки могут иметь только примесное происхождение, причем электронный уровень в этом случае должен соответствовать сильно связанному состоянию малого радиуса. В обоих случаях деформация решетки за счет присутствия электрона в ловушке не представляется большой. Пренебрегая электронным вкладом в ΔV_L , из уравнения (2) получаем, что энергия рекомбинационного излучения $E(r)$ может иметь величину 2 эВ лишь в том случае, когда глубины электронных ловушек E_e будут составлять $\sim 5-6$ эВ при расстояниях между заряженными центрами r от a_0 до $r \gg a_0$ (постоянная решетки ксенона $a_0 = 0,613$ нм). В работе [17] отмечено, что в экспериментах по фотовыходу электронов наблюдался эффект, соответствующий глубинам ловушек электронов от 2 до 7 эВ и времени жизни до нескольких часов. Природу таких глубоких состояний авторы не смогли объяснить. Известно, что оценка энергий связи электронных ловушек, проведенная по данным экспериментов по термолюминесценции, дает значения 60, 72 и 86 мэВ [22]. Основные неконтролируемые примеси в инертных газах — это другие атмосферные газы и вода. Энергия связи электронов на примесных ловушках атмосферных газов не может превышать энергии сродства к электрону. В ряду известных примесей наибольшая величина сродства к электрону у кислорода, она составляет 1,47 эВ. Напомним, что влияние концентрации примеси кислорода нами специально исследовалось и обсуждалось выше.

Другим важнейшим аргументом против версии рекомбинационного излучения является малая ширина полосы A (см. таблицу). Учет вклада последнего члена в формуле (2) приводит к известному по квазимолекулярному излучению полосы M эффекту — переход на отталкивательный терм основного состояния дает полосу шириной $\sim 0,5$ эВ. Таким образом, версия о таком рекомбинационном переходе

в основное состояние кристалла для излучения полосы A нам представляется необоснованной.

Рассмотрим предположение о существовании локальных возбуждений в зоне проводимости кристалла. В пользу переходов между возбужденными состояниями говорит тот факт, что положение максимума полосы A практически не зависит от температуры (см. таблицу). При повышении температуры наблюдается заметный сдвиг максимума излучения атомов и экситонов. Этот сдвиг связан с различным изменением взаимодействия электрона с решеткой для возбужденного состояния (большой радиус электронного состояния) и основного (радиус существенно меньше) при расширении кристалла. В приближении деформационного потенциала сдвиг описывается выражением

$$E(T') - E(T) = C\beta(T)(T - T'), \quad (3)$$

где $E(T)$ — положение максимума люминесценции; $\beta(T)$ — коэффициент объемного расширения; $C = C_1 - C_2$ — деформационный потенциал, соответствующий переходу из состояния «1» в состояние «2». Кристаллы инертных элементов обладают сильной экситон-фононной связью, экситону с $n = 1$ $\Gamma(3/2)$ соответствует $C = 1,3$ эВ. При повышении температуры максимум экситонной люминесценции $\Gamma(3/2)$ заметно смещается в область меньших энергий [2]. Аналогичный эффект наблюдается и для атомных возбуждений Хе в матрице при изменении ее плотности [1]. В отличие от экситонной люминесценции при изменении температуры положение основного максимума полосы A не изменяется. Такая ситуация отвечает переходам между локальными возбужденными состояниями, когда $C_1 \approx C_2 \approx C_e$ — деформационный потенциал электронного состояния в пределе большого радиуса. Для молекулярного локального состояния существует дополнительное условие независимости положения максимума излучения от температуры: состояния «1» и «2» должны иметь подобную форму потенциалов с одинаковыми межъядерными расстояниями.

Поскольку собственные локальные квазиатомные возбуждения в Хе не реализуются ни для нижайших экситонов, ни для дырок, наиболее вероятно объяснить происхождение излучения полосы A квазимолекулярным возбуждением. Увеличение интенсивности полосы A в спектре люминесценции смешанных кристаллов Ag–Хе при повышении концентрации Хе до 10% подтверждает предположение о молекулярном типе излучающих A -центров. При такой концентрации ксенона вероятность образования пар Хе–Хе в выращенном кристалле составляет около 75 % [32].

Энергия люминесцентного перехода между возбужденными состояниями молекулы $E_A = 2$ эВ устанавливает нижнюю границу энергетического положения излучательного состояния:

$$E_{\min} = T_e(I_u) + E_A \approx 7,95 + 2 = 9,95 \text{ эВ}, \quad (4)$$

где $T_e(I_u) \approx 7,95$ эВ — энергия нулевого колебательного уровня нижайшего возбужденного состояния молекулы Xe_2^* в кристалле [2]. Эта граница расположена приблизительно на 0,7 эВ выше дна зоны проводимости кристалла ($E_g = 9,30$ эВ).

Возможность образования локальных электронно-колебательных молекулярных экситонов в центре экситонной зоны теоретически обоснована в работе [4]. Необходимым условием этого процесса является наличие глубоких молекулярных состояний, расположенных в этой же энергетической области, и дефектов кристаллической структуры, стимулирующих локализацию экситонов. Процесс энергетической релаксации экситона в зоне разветвляется, что приводит к высвечиванию как свободных, так и локализованных экситонов. Следовательно, можно предположить, что резонансные возбуждения в зоне проводимости также образуют смешанные состояния с колебательными уровнями высокоэнергетичных молекулярных состояний Xe_2^{**} , расположенными в том же энергетическом диапазоне. Взаимодействие таких экситонных поляронов с дефектами приводит к релаксации возбуждения по локальной системе колебательных уровней и высвечиванию из локальных центров.

4.2. Идентификация излучающих состояний

Переходя к анализу возможных возбужденных состояний, ответственных за излучение полосы А ксенона с энергией 2 эВ, напомним, что температурные зависимости ее ширины и положения максимума свидетельствуют в пользу того, что верхний и нижний молекулярные потенциалы имеют близкие значения межъядерного расстояния r_e и обладают похожей формой. Схема молекулярных и атомных состояний ксенона представлена на рис. 10. Нижайшими связанными молекулярными состояниями Xe_2^* являются состояния 1_u , 0_u^- ($6s^3P_2$) и 0_u^+ ($6s^3P_1$). Параметры этих потенциалов в газовой фазе хорошо определены ($D_e = 0,53$ эВ, $r_e = 0,31$ нм) [33]. Эти потенциалы сходятся к атомным термам $6s[3/2]_{2,1}$ с энергией 8,315 и 8,436 эВ. Таким образом, если излучательный переход происходит на нижайший колебательный уровень Xe_2^* , то межъядерное расстояние верхнего потенциала должно составлять $r_e \approx 0,3$ нм и располагаться приблизительно на 2 эВ выше нулевого колебательного уров-

ня нижайшего состояния возбужденной молекулы Xe_2^* .

Расчеты потенциальной энергии молекул Xe_2^* [34] показывают, что связанные состояния, удовлетворяющие этим условиям, действительно существуют. Близко расположенные потенциалы $(6)0_g^-, (7)0_g^+, (9)1_g, (4)2_g, (10)1_g, (11)1_g, (7)0_g^-$ и $(8)0_g^+$, указанные в порядке возрастания энергии, соответствуют этим условиям (см. рис. 10). Состояния $(6)0_g^-, (7)0_g^+, (9)1_g, (4)2_g, (10)1_g$ коррелируют с $7p$ атомной асимптотой и описываются конфигурацией $A\pi_u7p$ (они представлены на вставке рис. 10, цифрами 1–3 обозначены первые три из них). Нижайшие четыре состояния имеют конфигурацию 3P_g , а $(10)1_g$ — конфигурацию 1P_g . Более высоколежа-

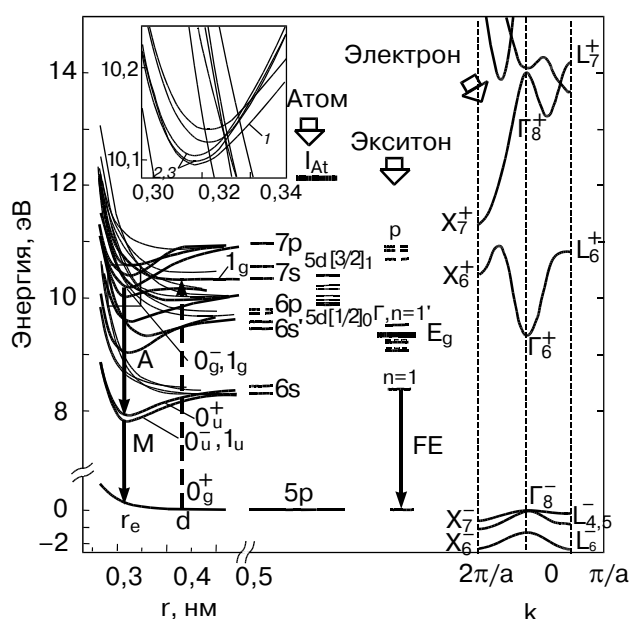


Рис. 10. Энергетическая схема молекулярных потенциалов и атомных состояний ксенона (слева). Совокупности атомных состояний $6p$, $7s$ и $7p$ обозначены для простоты одним уровнем, соответствующим их среднему значению, уровни $5d$ представлены полностью. Сплошными стрелками обозначены излучение полосы А и локализованных экситонов (М), штриховой — поглощение из основного состояния, соответствующего ближайшему межъядерному расстоянию в кристалле d . На вставке: молекулярные потенциалы Хе в области 10,2 эВ [32], потенциальные кривые, обозначенные цифрами 1–3, соответствуют состояниям $(6)0_g^-, (9)1_g$ и $(7)0_g^+$ в порядке возрастания энергии. В центре — экситонные состояния ксенона. Положение Γ -экситонов обозначено сплошными линиями, p -экситонов — пунктиром [25], а дно зоны проводимости E_g — толстой линией. Стрелкой показан излучательный переход свободного экситона (FE). В правой части — рассчитанные состояния валентных зон и зон проводимости ксенона [38].

щие состояния $(7)0_g^-$, $(11)1_g$, и $(8)0_g^+$ имеют конфигурацию $^3\Sigma_g^+$ и $^1\Sigma_g^+$, коррелируют с $7s$ атомными состояниями и являются квазисвязанными. Они имеют высокий барьер к диссоциации к более низколежащим $5d$ атомным термам. Расчеты показывают, что правая ветвь молекулярных потенциалов $(6)0_g^+$, $(9)1_g$, $(7)0_g^+$, $(4)2_g$, $(10)1_g$ пересекается отталкивательными термами, однако нижайшие колебательные уровни могут иметь достаточно большое время жизни относительно преддиссоциации [34]. Указанные молекулярные состояния имеют ненулевой дипольный момент перехода на нижние связанные состояния молекулы $\text{Xe}_2^* 0_u^+(6s^3P_1)$ и $1_u, 0_u^-(6s^3P_2)$.

Экспериментальное подтверждение наличия таких состояний в газовой фазе получено методом нестационарного поглощения молекулы Xe_2^* из нижайших возбужденных состояний $0_u^+(6s^3P_1)$ и $1_u, 0_u^-(6s^3P_2)$. Спектр поглощения в области 2,22 эВ представляет собой две структурированные полосы, состоящие из набора перекрывающихся компонент [34]. Первая полоса была отнесена к переходу из нижнего возбужденного молекулярного состояния $0_u^+(6s^3P_1)$ в возбужденные состояния $(9)1_g$, $(10)1_g$ и $(11)1_g$. Вторая — к переходам из $1_u, 0_u^-(6s^3P_2)$ в состояния $(9)1_g$, $(10)1_g$, $(11)1_g$, $(4)2_g$ и $(7)0_g^-$. Спектр нестационарного поглощения молекулы Xe_2^* в газовой фазе показан на рис. 6 в сравнении с излучением в полосе А. Мы провели простую реконструкцию спектра группы полос вблизи 2,21 эВ, представив их как сумму трех гауссианов с полушириной 0,007 эВ. При сохранении относительной интенсивности отдельных компонент и увеличении ширины каждой полосы до 0,03 эВ за счет взаимодействия с решеткой полученный контур хорошо описывает центральную компоненту A_2 . Величина смещения максимума полосы в область меньших энергий $\Delta E_S = 0,15$ эВ соответствует кристаллическому сдвигу за счет разницы поляризационного взаимодействия с окружением верхнего (излучающего) состояния и нижнего молекулярного термина.

В кристаллическом ксеноне, в соответствии с принципом Франка—Кондона, поглощение из основного состояния может возбуждать только зонные состояния или локальные с $r_e \sim d = 0,43$ нм, а при нестационарном поглощении Xe_2^* может происходить заселение локализованных экситонов с $r_e \sim 0,3$ нм. Исследование нестационарного поглощения в кристаллах инертных газов проведено в работах [35,36]. В результате для Хе в [35] получено, что разрешенный переход $^3\Sigma_u^+ - ^3\Pi_g$ из нижайшего возбужденного состояния имеет энергию меньше 1,1 эВ. В интересующем нас энергетическом диапазоне 1,1–3 эВ наблюдается континуальное погло-

щение, интенсивность которого довольно высока, но недостаточное разрешение при регистрации этого спектра в работе [35] (0,1 эВ) не позволило выделить в нем тонкую структуру. Для криптона, наиболее близкого по структуре и свойствам к ксенону, наблюдалось поглощение с $E_{\max} = 1,2$ эВ между нижайшими возбужденными молекулярными термами $^3\Sigma_u^+ - ^3\Pi_g$, а также дополнительные структуры при 1,6 и 2,5 эВ. Матричный сдвиг нестационарного поглощения в криптоне составляет $\Delta E_S \approx 0,1$ эВ. Небольшая величина ΔE_S свидетельствует о близком сходстве молекулярных термов в газовой и кристаллической фазах. Сдвиг между спектром поглощения и спектром люминесценции в кристаллическом криптоне составляет 0,11 эВ, т.е. изменение энергии релаксации окружения дает сравнительно небольшой вклад в энергию перехода. Эти данные могут служить ориентиром для оценки величины и направления возможного сдвига различных молекулярных потенциалов Xe_2^{**} при переходе от газовой к кристаллической фазе.

В кристаллическом состоянии за счет поляризационного взаимодействия с окружением происходит понижение энергии уровней Xe^* с большим радиусом возбуждения $7s$ и $7p$. Энергия поляризационного взаимодействия электрона, находящегося в междоузлии, составляет $\Phi_e = -2,26$ эВ, а для дырки, находящейся на узле, $\Phi_h = -1,35$ эВ [37]. Если электрон возбужденного атома имеет промежуточный радиус, как в случае возбуждений $\text{Xe}^* 5p^56s, 5p^56p$, то его взаимодействие больше определяется отталкиванием с окружением, которое лишь в некоторой степени компенсируется поляризационным притяжением. Соответственно, локальный кристаллический атомный уровень (примерно середина зоны) экситонов $\Gamma(3/2)$ и $\Gamma(1/2)$, генетически связанных с возбужденными атомными состояниями $5p^56s$ и $5p^56s'$, имеет сдвиг в область более высоких энергий $\sim 0,4$ эВ. Для s -состояний с большими радиусами электронной орбиты, т.е. ns с $n > 6$, поляризационное взаимодействие проявляется в полной мере и должно наблюдаться понижение уровней по отношению к уровням в спектре газа и сжатие спектра. Это соответствует понижению атомного потенциала ионизации для триплетных состояний $I_A = 12,13$ эВ до уровня дна зоны проводимости кристалла $E_g = 9,3$ эВ в точке Γ_6^+ зоны Бриллюэна, которая является пределом сходимости для s -экситонов (см. рис. 10). Для экситонов $\Gamma(1/2)$ предел сходимости E'_g может быть оценен:

$$E'_g = E_g + \Delta E_{SO} = 9,3 + 1,3 = 10,6 \text{ эВ}, \quad (5)$$

где ΔE_{SO} — спин-орбитальное расщепление.

Электронным состояниям с p -симметрией волновых функций в кристалле соответствует зона проводимости, минимум которой расположен в точке X_7^+ зоны Бриллюэна. При однофотонном возбуждении переходы из основного $5p$ в возбужденные p -состояния атомов и экситонов запрещены. Исследование возбуждения полосы M в режиме двухфотонного поглощения при $T = 158$ К [25] выявило серию полос поглощения, предел которой составляет $E_g(p) = (10,98 \pm 0,08)$ эВ (см. рис.8,а). Поскольку энергия перехода $X_7^- \rightarrow X_7^+$ составляет ~ 11 эВ [38], эти состояния расположены в нижней зоне проводимости и, по-видимому, имеют такую же природу происхождения, что и L, X -экситоны. Из соображений симметрии электронной волновой функции и энергетического положения эти возбуждения можно считать кристаллическим аналогом атомных $7p$ -термов. Тогда, как видно на рис. 10, молекулярные уровни, связанные с атомными $7p$ -состояниями, расположенными в области 10,9–11 эВ, практически не смещаются при переходе к твердой фазе. Это, кстати, означает, что поляризационное взаимодействие с кристаллом для p -состояний не соответствует модели двух точечных зарядов, как предполагалось при оценке Φ_e и Φ_h в [37]. Состояния, связанные с $7s$ и $7s'$, будут смещены в большей степени [1] в область E_g и E'_g соответственно. Молекулярные термы, связанные с возбуждениями малого радиуса $5d$ и промежуточного радиуса $6p$, должны остаться приблизительно при тех же энергиях, что и в газовой фазе. Локализация высокоэнергетичных экситонов может происходить с участием различных потенциалов в указанной области энергий, которые безызлучательно релаксируют к нижайшим молекулярным термам, обозначенным 1–3 на рис. 10. За счет различной конфигурации этих состояний в кристалле может возникнуть разница в кристаллическом сдвиге, что проявляется в расщеплении полосы A на компоненты A_1 – A_3 .

Кроме максимумов, соответствующих p -возбуждениям, в спектре фотовозбуждения полосы A вблизи 10,3 эВ наблюдается локальный максимум (обозначенный «2»), который отсутствует в спектре возбуждения свободного экситона (см. рис. 8,б). По всей видимости, состояния вблизи 10,3 эВ имеют каналы релаксации с непосредственным заселением локализованных состояний, связанных с A -центрами. Наиболее вероятными локальными возбуждениями, соответствующими этой энергии, являются молекулярные состояния, сходящиеся к атомному пределу $5d[3/2]_1$ вблизи 10,4 эВ. Переходы в эти состояния разрешены правилами отбора. Более того, в газовой фазе Хе наблюдаются полосы поглощения Xe_2 , связанные с этим атомным со-

стоянием [33]. Как правило, уровни $5d[3/2]_1$ заселяются при диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов [39]. Слабосвязанный молекулярный терм, сходящийся к атомному уровню $5d[3/2]_1$, имеет симметрию 1_g и небольшую глубину потенциальной ямы D_e равную 0,06 эВ при $r_e = 0,4$ нм, близком к расстоянию между ближайшими соседями в кристалле ($d = 0,43$ нм) [40]. Поэтому при фотонном возбуждении этот молекулярный терм может эффективно заселяться из основного состояния. В кристалле $5d$ -состояния преобразуются в узкие зоны и их связь с решеткой может быть существенно больше, чем у других возбуждений. В дальнейшем возможна безызлучательная релаксация, приводящая к заселению более глубоких молекулярных потенциалов другой симметрии, поскольку слабосвязанное состояние 1_g ($5d[3/2]_1$) пересекается множеством более глубоких потенциалов, в том числе связанных с $6p'$ - и $7p$ -атомными возбуждениями. В итоге излучательные переходы с энергией в области 2 эВ (полосы A_1 – A_3) могут осуществляться из состояний с глубоким минимумом (1–3 на рис. 10). Уменьшение интенсивности голубой компоненты A_3 при повышении температуры можно объяснить температурной активацией преодоления барьера, разделяющего минимум потенциала и пересекающие его отталкивательные термы.

4.3. Формирование высокоэнергетичных излучающих состояний в зоне проводимости кристаллического ксенона

Характер спектра поглощения кристаллического ксенона отражает силу кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой [27]. В легких кристаллах (Ne, Ar) с малой величиной диэлектрической проницаемости ($\epsilon_0 \sim 1,5$) экранирование кулоновского взаимодействия слабое и энергия связи экситонов велика. В поглощении основная доля интенсивности (вклад в силу осциллятора) приходится на область экситонов ($E < E_g$), а доля межзонных переходов ($E > E_g$) (в приближении двух зон) в Ar составляет около 40%, половина из них обусловлена резонансными состояниями типа L, X -экситонов. В тяжелых кристаллах (Kr, Xe) кулоновское взаимодействие слабее ($\epsilon_0 \sim 2$), энергия связи экситонов меньше и их вклад в поглощение при $E < E_g$ меньше половины (в Хе — 30%). При этом доля резонансных состояний составляет 62% и только 8% приходится на поглощение континуума свободных электронно-дырочных пар. Таким образом, с ростом атомного номера роль межзонных переходов в возбуждении кристалла увеличивается и более остро встает вопрос о механизмах сброса

(трансформации) энергии изначально возникших возбуждений и каналах заселения излучательных экситонных состояний.

Одним из важнейших вопросов является определение времени жизни резонансных состояний с учетом процесса распада на электроны и дырки, характера рекомбинации электронно-дырочных пар и эффективности рекомбинационного процесса для частиц с различными энергиями. Исследование спектров возбуждения полос люминесценции нижайших свободных и автолокализованных экситонов в совершенных кристаллах показало, что, несмотря на эффективное поглощение света в области межзонных переходов, возбуждение полосы M (Xe_2^*) при $E > E_g$ сильно падает. (Напомним, что в люминесценции обычно значительно преобладает излучение квазимолекулярных состояний, только в самых совершенных кристаллах наблюдается люминесценция свободных экситонов, сравнимая с люминесценцией M .) Это означает, что в целом при малых концентрациях дефектов эффективность рекомбинационного процесса низкая, т.е. возбуждения в области зоны проводимости либо покидают кристалл (тушение на подложке и т.п.), либо испытывают тушение на примесях. Вероятность этих процессов определяется большой длиной свободного пробега квазичастиц, поскольку предполагается, что выращен достаточно объемный кристалл с предельно малой концентрацией примесей. Пока что не понятно, могут ли резонансные состояния в зоне проводимости обладать такими большими диффузионными длинами. В то же время показателем процесса распада экситонов в области энергий выше $E'_g = 10,6$ эВ могло бы послужить обнаружение прямого канала (без задержки) образования локализованного состояния синглетного (возбужденного) состояния дырки с последующим излучением полосы B с $E_{\max} = 2,15$ эВ.

Особенно интригующим фактом, полученным в данной работе, является отсутствие сдвига во времени люминесценции полосы A относительно максимума фотовозбуждения при 13 эВ, что может означать возможность непосредственного заселения локализованных молекулярных состояний из состояний высокоэнергетичных свободных экситонов в этой области. Хотя, в соответствии с относительно плавным характером изменения спектра фотовозбуждения в области 13 эВ, вклад прямых процессов заселения A -центров из зоны проводимости не является доминирующим, представляется важным показать принципиальную возможность такого процесса и определить интервал энергий его возбуждения. Для этого необходимо более точное измерение затухания

полосы A с небольшим шагом по энергии возбуждения.

За исключением локальных максимумов (см. рис. 10, 1–3), между спектром возбуждения полосы A и долговременной рекомбинационной составляющей свободных экситонов в дефектных кристаллах наблюдается высокая степень корреляции (см. рис. 8,а). Это позволяет сделать вывод, что, кроме канала непосредственного возбуждения высокоэнергетичных экситонов, вторым каналом заселения полосы A является рекомбинация автолокализованных дырок и свободных электронов, которая также может приводить к заселению высокоэнергетичных экситонных состояний, локализующихся в высокоэнергетичные молекулярные экситоны. Этот процесс является двухступенчатым, требующим дополнительного времени для энергетической релаксации дырок и электронов. Такой вывод согласуется с наличием временной задержки $\Delta t \approx 5$ нс между максимумом фотовозбуждения полосы A с энергией $E_v = 21$ эВ и максимумом ее излучения (см. рис. 9). Временной сдвиг Δt имеет такой же порядок, как и в случае возбуждения свободных экситонов фотонами с избыточной энергией $E_v - E_g \sim 1,5$ эВ выше дна зоны проводимости. Величина Δt зависит от степени дефектности кристалла и составляет ~ 5 – 10 нс [8,9]. Сдвиг Δt наблюдается только в кристаллах с дефектами и определяется временем, необходимым для энергетической релаксации электронов, участвующих в рекомбинации с дырками, локализованными на дефектах [9].

Как показано в [9], рекомбинация термализованного электрона с локализованной дыркой происходит за короткие времена и последующая релаксация возбуждений в область верхних ($n > 2$) зонных экситонов также происходит без задержки. Тот факт, что возбуждение светом с $E_v = 8,9$ эВ приводит к задержке во времени излучения в полосе A , можно объяснить следующей схемой процесса: рекомбинация дырок и термализованных электронов ведет к каналу заселения свободных экситонов без задержки, далее экситон должен быть поглощен другим (локализованным) возбужденным состоянием (для увеличения вероятности процесса желателен долгоживущим), возбуждение попадает в область высоких энергий, а задержка происходит по пути релаксации к состоянию A -центра.

Очень высокая степень чувствительности полосы A , так же как и свободных экситонов, к наличию даже малого количества примесей свидетельствует о том, что в заселении состояний, ответственных за излучение полосы A , участвуют зонные возбуждения с большой длиной свободного пробега, т.е. электроны и экситоны, первые — на этапе рекомби-

нации электронов и локализованных дырок, вторые — при экситонном возбуждении локальных долгоживущих состояний. И те, и другие с большой эффективностью захватываются примесным кислородом. Этому способствует положительное сродство к электрону атома кислорода и энергетически более низкое расположение эксимерных термов Xe^+O по сравнению с экситонными состояниями [21]. Поскольку чувствительность локальных центров Xe_2^{+*} (полоса *B*) к примесям значительно ниже, можно сделать вывод, что сечение захвата экситонов на соответствующие возбуждению полосы *A* локальные центры меньше, чем у ионных центров, а концентрация таких центров меньше, чем примесей в номинально чистом ксеноне. Такой ситуации соответствует процесс захвата экситонов нейтральными долгоживущими возбужденными центрами. Этими долгоживущими состояниями могут быть нижайшие долгоживущие термы молекулы Xe_2^* или трехцентровые возбуждения, излучение из которых (M_3) в виде полосы с $E_{\text{max}} = 7,6$ эВ проявляется только при $T > 50$ К. В пользу последнего утверждения говорит совпадение максимума «1» возбуждения полосы *A* при $E = 8,9$ эВ с аналогичным максимумом возбуждения полосы M_3 (см. рис. 8). Заметим, что область энергий вблизи 8,9 эВ соответствует возбуждению экситонов с $n = 2$, обладающих в 4 раза большим радиусом возбужденного состояния ($r_{\text{ex}} \sim 2a_0$), чем у экситонов с $n = 1$. Как показано в [10], поляризационное притяжение такого экситона к другому возбуждению существенно больше, чем нижайшего экситона, а значит, и сечение захвата больше.

Различная природа формирования излучения полос *A* и *B* проявляется в люминесценции кристаллов, осажденных при различных температурах. В мелкодисперсных образцах на границах гранул вероятнее всего образуются большие дефекты, которые могут стать ловушкой для электронов (в совершенном кристалле Хе электрон не может локализоваться). Поскольку локализация электронов только удлиняет продолжительность жизни локализованных дырок Xe_2^+ , препятствуя их рекомбинации с электроном, это приводит к увеличению интенсивности полосы *B*. Напротив, эффективность заселения состояний, связанных с рекомбинационными процессами, существенно уменьшается, и интенсивность полосы *A* в мелкодисперсных кристаллах падает практически до нуля.

При электронном способе возбуждения в кристалле образуется избыточная концентрация электронов, что обуславливает более высокую вероятность рекомбинации, чем при фотовозбуждении. Соответственно, при электронном возбуждении ин-

тенсивность полосы *A* явно преобладает над ионной полосой *B* по сравнению с фотовозбуждением.

Заключение

Проведено комплексное экспериментальное исследование основных характеристик полосы излучения кристаллического ксенона с $E_{\text{max}} = 2$ эВ (полоса *A*) в зависимости от температуры, концентрации примесей, совершенства структуры решетки и дозы облучения. Проведено сравнение параметров излучения этой полосы с аналогичными параметрами полос излучения свободных экситонов, локализованных дырок Xe_2^{+*} и примесных центров Xe_2O^* , которые параллельно регистрировались на тех же образцах. Излучение с аналогичной структурой с $E_{\text{max}} = 2,05$ эВ обнаружено также в бинарных кристаллах Ag+Xe при высоких (~ 10%) концентрациях ксенона. Проанализированы спектры фотовозбуждения полосы *A* и кривые затухания люминесценции во времени. Сделан вывод, что наблюдаемое излучение связано с собственными возбужденными состояниями молекулярного типа, локализованными в объеме кристалла и расположенными по энергии в зоне проводимости вблизи 10 эВ. Возможно, что этими состояниями являются термы $(6)0_g^-$, $(9)1_g$ и $(7)0_g^+$, связанные с атомными возбуждениями $7p$ [34]. Они расположены в соответствующей энергетической области, обладают достаточно глубокими минимумами на потенциалах $D_e \approx 0,7$ эВ и не пересекаются отталкивательными ветвями других состояний непосредственно в минимуме потенциала. Излучательный переход осуществляется на нижайшие связанные возбужденные молекулярные термы $1_u, 0_u^-(6s^3P_2)$.

Получен интригующий результат, свидетельствующий о существовании прямого (без задержки) канала заселения излучающих состояний при возбуждении кристалла в области зоны проводимости. Показано, что возбуждение *A*-центров может осуществляться в процессе рекомбинации свободного электрона с локализованной дыркой. Ниже зоны проводимости формирование излучающих состояний, скорее всего, происходит с участием двух возбуждений. Одним является свободный экситон, другим должно быть долгоживущее локальное возбужденное состояние. Возможно, это специфическое трехцентровое состояние, ответственное за высокотемпературное излучение с энергией 7,6 эВ. Полученные результаты свидетельствуют в пользу накопления долгоживущих возбужденных центров в кристалле ксенона в процессе облучения.

1. N. Schwentner, E.E. Koch, and J. Jortner, *Electronic Excitations in Condensed Rare Gases*, Springer-Verlag, Berlin (1985).
2. I.Ya. Fugol', *Adv. Phys.* **27**, 1 (1978); *ibid.* **37**, 1 (1988).
3. G. Zimmerer, in: *Excited-State Spectroscopy in Solids*, XCVI Corso Societa Italiana di Fisica, Bologna (1987), p. 37.
4. A.M. Ratner, *J. Lumin.* **81**, 271 (1999).
5. A.M. Ratner, *Phys. Lett.* **A265**, 411 (2000).
6. И.Я. Фуголь, Е.И. Тарасова, *ФНТ* **23**, 767 (1997).
7. A.M. Ratner and E.I. Tarasova, *Phys. Status Solidi* **B170**, 135 (1992).
8. B. Steeg, E. Gminder, M. Kirm, V. Kisand, S. Vielhauer, and G. Zimmerer, *J. Electr. Spectr. and Related Phenom.* **101–103**, 879 (1999).
9. I. Reimand, E. Gminder, M. Kirm, V. Kisand, B. Steeg, D. Varding, and G. Zimmerer, *Phys. Status Solidi* **B214**, 81 (1999).
10. A.N. Ogurtsov, A.M. Ratner, E.V. Savchenko, V. Kisand, and S. Vielhauer, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 2769 (2000).
11. E.V. Savchenko, O.N. Grigorashchenko, O.M. Sokolov, J. Agreiter, N. Caspary, A. Lammers, and V.E. Bondybej, *J. Electr. Spectr. and Related Phenom.* **101–103**, 377 (1999).
12. O.N. Grigorashchenko, E.V. Savchenko, O.M. Sokolov, J. Agreiter, N. Caspary, A. Lammers, and V.E. Bondybej, *J. Mol. Structure* **480**, 523 (1999).
13. G. Zimmerer, *J. Low Temp. Phys.* **111**, 629 (1998).
14. А.Г. Белов, В.Н. Свищев, И.Я. Фуголь, Е.М. Юртаева, *ФНТ* **9**, 1206 (1983).
15. А.Г. Белов, В.Н. Свищев, Е.М. Юртаева, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **47**, 1380 (1983).
16. И.Я. Фуголь, А.Г. Белов, В.Н. Свищев, Е.М. Юртаева, М.Н. Якименко, Ю.М. Александров, В.Н. Махов, Т.И. Сырейщикова, *Труды VI Всесоюзн. сов. по использованию синхротронного излучения СИ-84, ИЯФ СО АН СССР, Новосибирск* (1984), с. 315.
17. M. Havecker, M. Runne, and G. Zimmerer, *J. Electr. Spectr. and Related Phenom.* **79**, 103 (1996).
18. M. Havecker, *Diploma Thesis*, The University of Hamburg (1996).
19. Е.М. Юртаева, И.Я. Фуголь, А.Г. Белов, *ФНТ* **16**, 101 (1990).
20. Ю.М. Александров, В.Н. Колобанов, В.Н. Махов, Т.И. Сырейщикова, М.Н. Якименко, *ЖПС* **36**, 941 (1982).
21. А.Г. Белов, Е.М. Юртаева, *ФНТ* **27**, 1268 (2001).
22. M. Kink, R. Kink, V. Kisand, J. Maksimov, and M. Selg, *Nucl. Instr. and Meth.* **B122**, 668 (1997).
23. G. Baldini, *Phys. Rev.* **128**, 1562 (1962).
24. A.N. Ogurtsov, E.V. Savchenko, E. Gminder, S. Vielhauer, and G. Zimmerer, in: *Book of Abstracts of 4th Intern. Conf. On Cryocrystals and Quantum Crystals CC'2002*, Friesing, Germany (2002), B-21.
25. H. Pournasr, J.P. Holder, and J.W. Keto, *Phys. Rev.* **B54**, 864 (1996).
26. A.M. Ratner, I.Ya. Fugol', A.G. Belov, and U.L. Steshenko, *Phys. Lett.* **A137**, 403 (1989).
27. U. Rossler and O. Schutz, *Phys. Status Solidi* **B56**, 483 (1973).
28. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
29. J. Kraft, A. Schrimpf, B. Schweitzer, K. Ibbeken, and H.-J. Stockmann, *Europhys. Lett.* **39**, 459 (1997).
30. F. Williams, *Phys. Status Solidi* **25**, 493 (1968).
31. *Криокристаллы*, Б.И. Веркин, А.Ф. Прихотько (ред.), Наукова Думка, Киев (1983).
32. С. Крейдок, А. Хинчклиф, *Матричная изоляция*, Мир, Москва (1978).
33. К.П. Хьюбер, Г. Герцберг, *Константы двухатомных молекул*, Мир, Москва (1984).
34. C. Jonin, P. Laporte, and F. Spiegelmann, *Chem. Phys. Lett.* **308**, 13 (1999).
35. T. Suemoto, Y. Kondo, and H. Kanzaki, *Solid State Commun.* **225**, 669 (1978).
36. T. Suemoto and H. Kanzaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 1554 (1979).
37. A.M. Ratner, *Phys. Rep.* **269**, 198 (1996).
38. U. Rossler, in: *Rare Gas Solids*, M.L. Klein and J.A. Venables (eds.), Vol. 1, Academic Press, London (1976), p. 505.
39. A.F. Borghesani, G. Bressi, G. Carugno, E. Conti, and D. Iannuzzi, *J. Chem. Phys.* **115**, 6042 (2001).
40. X.K. Hu, D.M. Mao, S.S. Dimov, and R.H. Lipson, *J. Chem. Phys.* **106**, 9411 (1997).

Local excitations in the conduction band of xenon crystal

A.G. Belov, E.I. Tarasova, and E.M. Yurtaeva

The basic characteristics of the luminescence band with $E_{\max} = 2$ eV (band A) are studied comprehensively as a function of temperature, impurity concentration, lattice structure perfection and irradiation dose. The band A parameters are compared with similar parameters of free excitons, localized holes Xe_2^{+*} and impurity centers Xe_2O^* , whose bands were detected concurrently. The photoexcitation spectra and time-resolved spectra of the band A luminescence are also analyzed. Radiation of similar structure with $E_{\max} = 2,05$ eV was also observed in binary crystals Ar+Xe at high (~ 10%) xenon concentrations. The conclusion is drawn that the observed luminescence originates from the intrinsic excited molecular type states localized in the bulk of the crystal and having energies within the conduction band close to 10 eV.