



A NEW FUNDAMENTAL HYDROGEN DEFECT IN ALKALI-HALIDES

S. Morato, F. Lüty

► To cite this version:

S. Morato, F. Lüty. A NEW FUNDAMENTAL HYDROGEN DEFECT IN ALKALI-HALIDES. Journal de Physique Colloques, 1976, 37 (C7), pp.C7-161-C7-161. 10.1051/jphyscol:1976735 . jpa-00216892

HAL Id: jpa-00216892

<https://hal.science/jpa-00216892>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

A NEW FUNDAMENTAL HYDROGEN DEFECT IN ALKALI-HALIDES (*)

S. MORATO (†) and F. LÜTY

Physics Department, University of Utah, Salt Lake City, Utah, U. S. A.

Résumé. — L'hydrogène atomique sous ses formes neutre (H^0) et chargée (H^-) en positions substitutionnelle et interstitielle, donne lieu à des défauts bien caractérisés dans les halogénures alcalins (centres U , U_1 , U_2 , U_3) et qui ont été étudiés extensivement dans le passé.

Lors de l'étude de la décomposition photochimique du OH^- une nouvelle configuration de l'hydrogène atomique chargé a été découverte. Ce défaut qui peut être produit en grande quantité, par des techniques différentes (UV ou RX), dans des cristaux dopés en OH^- , SH^- et H^- , ne présente pas d'absorption électronique prononcée mais par contre possède un mode localisé étroit à 1114 cm^{-1} dans KCl avec un déplacement isotopique ($H \rightarrow D$) presque parfait de $\sqrt{2}$. L'étude détaillée de la cinétique de formation de ce défaut à basse température montre qu'il est formé au départ par la réaction d'un crowdion Cl_2^- mobile (centre H) avec l'hydrogène. Nous discuterons d'un modèle consistant, pour ce nouveau défaut hydrogène à partir des données expérimentales sur son mode localisé et sur les cinétiques de formation.

Abstract. — Atomic hydrogen in neutral (H^0) and negative (H^-) form on substitutional and interstitial lattice sites gives rise to well-characterized model defects in alkali-halides (U , U_1 , U_2 , U_3 centers), which have been extensively investigated in the past. When studying the photo-decomposition of OH^- defects, a new configuration of atomic charged hydrogen was discovered, which can be produced in large quantities in the crystal and is apparently not connected to any other impurity. This new hydrogen defect does not show any pronounced electronic absorption, but displays a single sharp local mode band (at 1114 cm^{-1} in KCl) with a perfect $\sqrt{2}$ $H \rightarrow D$ isotope shift. The defect can be produced by various UV or X-ray techniques in crystals doped with OH^- , SH^- or H^- defects. A detailed study of its formation kinetics at low temperatures shows that it is primarily formed by the reaction of a mobile Cl_2^- crowdion (H-center) with hydrogen defects. Attempts will be discussed to derive from the local mode and formation-kinetics data a consistent model for this new hydrogen defect.

(*) Supported by NSF Grant DMR-74-02516-A02.

(†) Present address : Instituto de Energia Atomica, Sao Paulo, Brazil.