

El centro F_2 en cristales mixtos

R. Rodríguez

*Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora, apartado postal A-088,
83190 Hermosillo, Sonora*

E. Camarillo

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, apartado postal 20-364,
01000 México, D.F.*

(recibido el 26 de enero de 1987; aceptado el 19 de noviembre de 1987)

Resumen. Usando el modelo de la molécula H_2 sumergida en un dieléctrico, se realiza un estudio teórico sencillo del corrimiento de la banda M_1 en halogenuros alcalinos cristalinos mixtos. Se encuentran valores teóricos menores a los experimentales; se especula que la diferencia se debe al efecto de dislocaciones.

PACS: 61.70.Dx

1. Introducción

El estudio experimental de los centros de color en cristales de halogenuros alcalinos mixtos ha sido muy escaso. Para el Centro F, que es el defecto primario básico, hay unos cuantos trabajos [1, 2, 3]. Para otro tipo de centros de color, tales como el Centro F_2 , únicamente hay resultados, hasta donde conocemos, en el trabajo de Smakula [2], el cual reporta resultados para el $RbCl_{(1-X)}:K_XCl$ en algunas concentraciones X de los componentes del cristal mixto. Muy recientemente Asami y colaboradores [4], han realizado un estudio experimental detallado del Centro F_A en $KCl:KBr$, especulando sobre la posibilidad de utilizar este tipo de cristales en láseres de centros de color.

En el aspecto teórico también hay pocos trabajos para centros de color en halogenuros alcalinos mixtos. En el caso del Centro F, el comportamiento no-lineal típico de la banda F, conforme varía la concentración, no ha sido modelada. Se han hecho estudios recientes [5, 6], realizando cálculos para el comportamiento de la banda F para diversas concentraciones del cristal mixto. En general se encontró un comportamiento no lineal de la banda F conforme varía la concentración. Sin embargo, estos valores son menores a los experimentales. En los cálculos se usaron para las constantes características, funciones que varían linealmente con la concentración, en base al comportamiento de la constante de red que sigue la regla de Vegard [7]:

$$a_M = a_1(1 - X) + a_2X, \quad (1)$$

donde a_M sería la constante de red del cristal mixto y a_1 y a_2 las constantes de red de cada una de las componentes del cristal. Para las otras constantes tales como la dieléctrica de alta y baja frecuencia, y el radio de la vacancia, se usaron relaciones con el mismo comportamiento lineal.

Para el caso de defectos de tipo molecular, ningún estudio teórico se ha realizado. En particular puede plantearse algún modelo para el Centro F_2 sumergida en un dieléctrico, aprovechando su analogía con la molécula H_2 , la cual no es únicamente cualitativa, sino también cuantitativa, como ya lo han demostrado diversos autores [8,9,10]. Para el cristal mixto, los niveles de la molécula H_2 se escalarían usando constantes que varían con la concentración.

El objeto de este trabajo es llevar a cabo el estudio teórico del Centro F_2 en halogenuros alcalinos mixtos, en base a este tipo de modelos que utilizan los resultados de la molécula H_2 .

2. Desarrollo teórico

Si r es la distancia entre los defectos, tal como se desarrolla en detalle en el trabajo de Rodríguez *et al.* [10], entonces la distancia correspondiente en la molécula H_2 será:

$$r' = r/K_0, \quad (2)$$

donde K_0 es la constante óptica de alta frecuencia. Para el caso de los cristales mixtos, será necesario tomar a r y K_0 como cantidades que sean función de la concentración. Una forma razonable para r es la regla de Vegard [7], dada por la ecuación (1), así,

$$r = r_1(1 - X) + r_2X, \quad (3)$$

donde r_1 y r_2 son las distancias entre los defectos en cada uno de los componentes del cristal mixto, así tendremos:

$$r'(X) = \frac{r_1(1 - X) + r_2X}{K_0(X)}. \quad (4)$$

Para obtener la energía correspondiente a $r'(X)$ denotada como $E'(X)$ utilizaremos las curvas de niveles de energía en función de la distancia [10], o una tabla con los valores tabulados. Así obtendremos $E(X)$ como:

$$E(X) = \frac{E'(X)}{[K_0(X)]^2}, \quad (4a)$$

$E'(X)$ obtenida de los datos para la molécula H_2 .

Entonces, para obtener los niveles de energía de interés y conocer como varían con la concentración en un cristal mixto, será necesario conocer el comportamiento de $K_0(X)$. Así, lo que restaría será utilizar la $K_0(X)$ más apropiada. Se puede usar una relación lineal, tal como se hace para el Centro F. Sin embargo, en un trabajo de Kamiyoshi *et al.* [11], encuentran una relación para la constante dieléctrica de baja frecuencia, en función de la concentración, la cual tiene un comportamiento no-lineal; la expresión teórica que obtienen está de acuerdo con sus resultados experimentales. Para la constante dieléctrica óptica o de alta frecuencia, hasta donde sabemos, no se ha obtenido una relación de su comportamiento con la concentración X de las componentes del cristal mixto.

Aquí, por tanto, deduciremos una expresión para $K_0(X)$, siguiendo las mismas ideas de Kamiyoshi *et al.* [11] para la obtención de la constante dieléctrica estática. Este último autor parte de la ecuación de Clasius-Mosoti, que relaciona la constante dieléctrica con las propiedades eléctricas microscópicas, a través de la polarizabilidad. Para la constante dieléctrica óptica, usaremos la ecuación de Lorentz-Lorentz (Fowler) [12], la cual es:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} N(\alpha' + \alpha), \quad (5)$$

con n el índice de refracción, N el número de iones en la unidad de volumen, y α' y α las polarizabilidades de cada uno de los iones componentes del cristal.

Ya que $n^2 = K_0$, se puede obtener, en forma preliminar, para dos cristales distintos con constantes de red equivalentes y en los cuales cambia un ión, una expresión para K_0 en el cristal mixto. Para esto usamos

$$\frac{K_{01} - 1}{K_{01} + 2} = \frac{4\pi}{3} N'(\alpha_1 + \alpha) \quad (6)$$

y

$$\frac{K_{02} - 1}{K_{02} + 2} = \frac{4\pi}{3} N'(\alpha_2 + \alpha),$$

con N' número de iones por unidad de volumen. Este caso es válido en cristales como KCl:NaCl. Si para los iones que cambian, suponemos válida una Regla de Vegard para las polarizabilidades, se tiene:

$$\alpha_M = \alpha_1(1 - X) + \alpha_2 X. \quad (7)$$

Así tendremos un tipo de cristal mixto:

$$\frac{K_0 - 1}{K_0 + 2} = \frac{4\pi}{3} N(\alpha_M + \alpha) = \frac{4\pi}{3} N[\alpha_1(1 - X) + \alpha_2 X + \alpha], \quad (8)$$

sumando y restando la cantidad αX , tenemos

$$\begin{aligned} \frac{K_0(X) - 1}{K_0(X) + 2} &= \frac{4\pi}{3} N(\alpha_1 + \alpha)(1 - X) + \frac{4\pi}{3} N(\alpha_2 + \alpha)X \\ &= \frac{K_{01} - 1}{K_{01} + 2}(1 - X) + \frac{K_{02} - 1}{K_{02} + 2}X. \end{aligned} \quad (9)$$

Si cambian los dos iones es fácil ver que la expresión es igualmente válida y funciona para cristales tales como KBr:RbCl. Despejando $K_0(X)$, obtenemos, finalmente, para el tipo de cristal mixto que se discute

$$K_0(X) = \frac{(K_{02} + 2)K_{01} + 2(K_{02} - K_{01})X}{K_{02} + 2 - (K_{02} - K_{01})X} \quad (10)$$

la cual difiere de la relación lineal $K_0(X) = K_{01}(1 - X) + K_{02}X$ usada para el Centro F [5]. Entonces esta expresión se puede utilizar en las ecuaciones (3) y (4), para cristales con constantes de red equivalentes, y como primera aproximación para otros halogenuros alcalinos cristalinos, en los cuales las constantes de red difieren entre sí en un porcentaje bajo.

En el caso más general en el cual las dos constantes de red no son equivalentes tales como en cristales de KCl:KBr, la N varía según las componentes en la expresión (6), y serán N_1 y N_2 para las componentes 1 y 2 respectivamente. Si escogemos una celda unitaria donde a_1 y a_2 son las constantes de red, con $N_i = n/a_i^3$, donde n es el número de iones en la celda, tendremos para el cristal halogenuro alcalino mixto, al cual corresponden cuatro iones de cada signo por celda unidad, la expresión

$$\begin{aligned} \frac{K_0 - 1}{K_0 + 2} &= \frac{4\pi}{3} \frac{4}{a_1^3(1 - X) + a_2^3X} [\alpha_1(1 - X) + \alpha_2X + \alpha] \\ &= \frac{16\pi}{3} \frac{\alpha_1(1 - X) + \alpha_2X + \alpha}{a_1^3(1 - X) + a_2^3X}, \end{aligned} \quad (11)$$

para cuando cambia un ión, y podremos obtener K_0 , conociendo las polarizabilidades de los iones y las constantes de red cristalinas. La relación propuesta para los volúmenes es similar a la de las polarizabilidades, ya que éstas son proporcionales a los volúmenes iónicos. Esta es la Regla de Retger, que se menciona más adelante.

Así, podemos analizar el cambio de los niveles de energía $E(X)$, utilizando las expresiones para $K_0(X)$, propuestas en el desarrollo anterior, conjuntamente con una expresión para $r(X)$ y así obtener la energía de transición entre dos niveles en el centro F_2 .

	KCl			KBr	
X		0.25	0.5	0.75	
$E_{1\sigma}$	-5.79	-5.6043	-5.4246	-5.2506	-5.0821
		-5.5996	-5.4186	-5.2463	
$E_{2\pi}$	-4.191	-4.0565	-3.9263	-3.8001	-3.6779
ΔE	1.599	1.548	1.499	1.451	1.404
ΔE_{exp}	1.544	—	—	—	1.409

TABLA I. Valores calculados de la banda $M_1(\Delta E)$ en eV, para el estado base $E_{1\sigma}$. En la primera fila se presentan los resultados obtenidos con el uso de la relación (10) y en la segunda con una relación lineal $K_0 = K_1(1 - X) + K_2X$. $E_{2\pi}$ es el estado excitado obtenido con (10) y $\Delta E = E_{2\pi} - E_{1\sigma}$. Al final los valores experimentales de Smakula [2].

La banda M_1 del Centro F_2 se puede obtener siguiendo la transición propuesta por Herman *et al.* [8, 10], la cual es:



Entonces, usando cada uno de estos estados en los resultados para la molécula H_2 , a través de la ecuación (4a), se puede obtener la banda M_1 para cada concentración del cristal mixto. Para obtener los valores se usó el método numérico de interpolación de spline cúbico [13], realizándose la interpolación en los datos para la molécula H_2 tabulados por Sharp [14].

3. Resultados considerando a K_0 como constante dieléctrica

Primeramente se realiza un cálculo de los estados de energía involucrados en la banda M_1 , usando relaciones aproximadas para K_0 . Así, para el cristal mixto $KCl_{(1-X)}:KBr_X$, se calcula, para distintos valores de X, el estado base $E_{1\sigma}$ usando las relaciones aproximadas definidas por la expresión (10) y una relación lineal del tipo: $K_0 = K_{01}(1 - X) + K_{02}X$. No hay gran diferencia en los resultados. El estado excitado se calcula usando (10) y se obtiene la energía de transición que define la banda M_1 . Los resultados aparecen en la tabla I. En estos cálculos se utilizó, para la separación entre los defectos, en distintas concentraciones, la Regla de Vegard según la expresión (3).

De estos resultados se puede inferir que de una manera sensible, la banda M_1 se va corriendo desde un valor de 1.599 eV para KCl hasta un valor de 1.409 eV para el KBr, según varía la concentración. Ya que el resultado final en la obtención de ΔE para la banda M_1 depende básicamente de las funciones $r(X)$ y $K_0(X)$, una manera de probar su efecto es analizar un caso en que se mantenga constante una de ellas, esto sucede para el cristal mixto $K_{(1-X)}Cl:Rb_XCl$, el cual debe tener un valor de $K_0 = 2.19$, ya que cada uno de los cristales puros que lo componen tienen este valor. Los resultados aparecen en la tabla II, de la cual se pueden obtener

	KCl				KBr
X		0.25	0.5	0.75	
$E_{1\sigma}$	-5.79	-5.7832	-5.7768	-5.7707	-5.765
$E_{2\pi}$	-4.191	-4.1862	-4.1815	-4.1764	-4.1715
ΔE	1.599	1.5971	1.5953	1.5944	1.5935
ΔE_{exp}	1.544	1.503	—	1.442	1.445

TABLA II. Valores calculados de la banda $M_1(\Delta E)$ en eV, usando $K_0 = 2.19$ y presentación de valores experimentales de Smakula [2], de manera similar a la Tabla I.

básicamente dos conclusiones: i) la variación de $r(X)$ tiene muy poco efecto en los resultados. ii) Esto está en desacuerdo con los resultados experimentales, lo cual puede indicar que alguna consideración está quedando fuera de nuestro modelo.

También en el caso de la constante de red o distancia interiónica, se puede tratar otra relación funcional, la cual se conoce como la Regla de Retger [15], dados como un promedio para los volúmenes:

$$a = (a_1^3(1 - X) + a_2^3X)^{1/3}. \quad (12)$$

Para algunos autores [15] esta regla se apega más a los resultados experimentales que la Regla de Vegard. En la tabla IIA aparecen los valores de la distancia interiónica en KCl:RbCl; usando la Regla de Vegard (R_1) y la Regla de Retger (R_2), las diferencias entre éstas es muy pequeña y para nuestros propósitos ambas relaciones nos llevan a similares resultados para la banda M_1 , aunque ya que el promedio de las polarizabilidades expresado en (7) implica un promedio de volúmenes, sería más realista mencionar a la Regla de Retger.

Finalmente nos interesa analizar el comportamiento de la banda M_1 para un cristal mixto, utilizando las expresiones físicamente más generales para obtener $K_0(X)$, dada por la ecuación (11).

Sin embargo, de la tabla I se puede observar que la diferencia entre los valores de la energía obtenidos, usando (10) y una relación lineal para K_0 , es relativamente pequeña. De la tabla II podemos observar que al no variar K_0 , los cambios de los valores a distintas concentraciones son pequeños, únicamente influenciados por la Regla de Vegard (o de Retger) para la constante de red; según estos valores es evidente que el cambio de la energía con la concentración depende básicamente de E'/K_0^2 . Así, para tratar el caso de $\text{KCl}_{(1-X)}:\text{KBr}_X$, se puede usar un valor promedio para $r' \approx 2 \text{ \AA}$, y los valores no difieren sustancialmente de los que aparecen en la tabla I al variar r' . Los valores de K_0 se obtienen de (11) y los resultados aparecen en la tabla III. En la tabla IIIA aparece tabulado K_0 usando (11).

De los resultados en la tabla III podemos observar que el corrimiento de la banda M_1 se despega de la linealidad por un valor δE , lo cual cualitativamente está de acuerdo con los resultados experimentales en otros cristales.

X	KCl:RbCl	
	R_L	R_c
0	2.03220552	2.03220552
.05	2.03547025	2.0356745
.1	2.03872956	2.0391148
.15	2.04198345	2.04252673
.2	2.04523193	2.0459106
.25	2.04847501	2.04926674
.3	2.05171269	2.05259545
.35	2.05494497	2.05589703
.4	2.05817186	2.059117176
.45	2.06139336	2.06241996
.5	2.06460949	2.06564189
.55	2.06782025	2.06883783
.6	2.07102563	2.07200807
.65	2.07422565	2.07515288
.7	2.07742031	2.07827251
.75	2.08060962	2.08136723
.8	2.08379358	2.0844373
.85	2.0869722	2.08748297
.9	2.09014548	2.09050449
.95	2.09331343	2.0935021
1	2.09647605	2.09647605

TABLA IIA. Valor promedio de la distancia entre los defectos en u.a. usando la Regla de Vegard (R_L) y la Regla de Retger (R_c) para el cristal mixto KCl:RbCl.

X	KCl			KBr
	0.25	0.5	0.75	
ΔE	1.79	1.6843	1.5662	1.38
ΔE_{exp}	1.544	—	—	1.409
δE		-2.485×10^{-3}	-0.017	-0.016

TABLA III. Valores de $M_1(\Delta E)$ en eV, usando (11) y (13), presentando el corrimiento δE en eV respecto a la línea que une los valores de energía de los cristales puros.

Finalmente, utilizando a K_0 como constante dieléctrica óptica, analizaremos el caso del cristal $\text{Rb}_{(1-X)}\text{Cl}_{(1-X)}:\text{K}_X\text{Br}_X$, en el cual cambian los dos iones a la vez. Ya que para ambos cristales la distancia interiónica tiene el valor de $a = 3.3 \text{ \AA}$ la relación (10) es estrictamente válida.

Si usamos un valor promedio para r' , encontramos que la diferencia de energía

KCl:RbCl	
X	K_0
.05	2.07
.1	2.08
.15	2.10
.25	2.12
.3	2.13
.35	2.15
.4	2.17
.45	2.18
.5	2.20
.55	2.21
.6	2.23
.65	2.24
.7	2.26
.75	2.27
.8	2.29
.80	2.30
.85	2.32
.90	2.33
.95	2.35
1	2.36

TABLA IIIA. Para el cristal mixto KCl:Br, se tabula K_0 en función de la concentración usando la expresión (11).

entre los estados base y excitados es $\Delta E' \simeq 7.67$ eV, entonces

$$\Delta E \equiv \frac{7.67}{K_0(X)^2}. \quad (13)$$

Los resultados aparecen en la tabla IV y podemos observar que los valores teóricos de δE son cualitativamente similares a los obtenidos para KCl:KBr, y en general al valor teórico en $X = 0.25$ resulta menor en un orden de magnitud respecto al resultado experimental, en $X = 0.75$ ambos valores resultan pequeños (teórico y experimental).

4. Discusión considerando a K_0 como parámetro fenomenológico

Siguiendo a Gourary y Adrian [16], mencionaremos que, en el estudio del Centro F_2 el uso de K_0 como constante dieléctrica óptica, es restringido en el modelo de la molécula de hidrógeno sumergido en el dieléctrico, ya que se puede considerar estrictamente válido para un número muy limitado de halogenuros alcalinos cristalinos. Así, para un análisis más general, consideran a K_0 como un parámetro fenomenológico, relacionado con la profundidad de los pozos de

	RbCl			KBr	
X		0.25	0.5	0.75	
ΔE	1.599	1.547	1.50	1.448	1.401
δE		-2.42×10^{-3}	-3.2×10^{-3}	-2.36×10^{-3}	
ΔE_{exp}	1.445				1.409
δE_{exp}		-25.3×10^{-3}		-9×10^{-4}	

TABLA IV. Para el cristal mixto RbCl:KBr, valores de la banda $M_1\Delta E$ en eV, usando (13), presentando δE , el corrimiento respecto a la línea recta que une los valores de las energías de los cristales puros, en sus valores teóricos y experimentales, usando los resultados de Smakula [2].

potencial y trabajan con valores de K_0 , obtenidos con la ayuda de la ley de Mollwo-Ivey para el centro F.

Usando esta ley el modelo del átomo de hidrógeno sumergido en el dieléctrico para el centro F [5, 12], se ajustaría a K_0 usando:

$$\frac{10.2}{K_0^2} = 17.7a^{-1.84}, \quad (14)$$

con la distancia interiónica en Angstroms. Obteniéndose para K_0

$$K_0 = 0.76a^{0.92}. \quad (15)$$

Este valor, ajustado para todos los halogenuros alcalinos, lo podemos aplicar al modelo que estamos usando para el Centro F₂, teniendo para r'

$$r' = \frac{r}{k_0} = \frac{\sqrt{2}a}{0.76a^{0.92}} \equiv 1.86a^{0.08}, \quad (16)$$

y para un cristal mixto, usando la Regla de Retger, se tiene

$$r' = 1.86[a_1^3(1-X) + a_2^3X]^{0.027}. \quad (17)$$

Podemos observar que en general para las distintas a 's y X 's, $a^{0.08} \simeq 1.1$ que implica un valor para $r' \simeq 2\text{\AA}$, lo cual está de acuerdo a nuestras estimaciones en la sección anterior.

Para la molécula diatómica H₂ esta distancia equivale a una energía $\Delta E' = 7.7$ eV entre los estados base y excitado, según la transición expresada por (11a). Entonces, usando (15) tendremos para la energía de transición de la banda M_1 en el cristal mixto

$$\Delta E(X) = \frac{13.27}{[a_1^3(1-X) + a_2^3X]^{0.613}}. \quad (18)$$

Así, con el uso de esta expresión, podemos recalcular el caso del mixto KCl:RbCl, en el cual las K ajustadas ya no coincidirían con K_0 . Los resultados aparecen en la tabla V, los valores de los corrimientos de la banda M_1 respecto a la línea que une los valores de las bandas M (los componentes puros), δE , aparecen por abajo de los valores experimentales.

	KCl			RbCl	
X		0.25	0.50	0.75	
ΔE	1.61	1.577	1.545	1.514	1.483
δE		-8.3×10^{-4}	-1.6×10^{-3}	-7.3×10^{-4}	
ΔE_{exp}	1.544	1.503	—	1.442	1.445
δE_{exp}		-16×10^{-3}		-27.7×10^{-3}	

TABLA V. Valores de la banda M_1 , ΔE en eV, para el cristal mixto KCl:RbCl, usando la expresión (18). Se presenta también el corrimiento δE y comparación con resultados experimentales de Smakula [2].

En la tabla VI se reportan las constantes utilizadas en todos los cálculos del trabajo.

	Cristales		
	KCl	KBr	RbCl
(a) K_0			
Constante dieléctrica	2.19	2.34	2.19
(a) a			
Distancia interiónica	3.147 (Å)	3.298 (Å)	3.291 (Å)
	Iones		
	K^+	Cl^-	Br^-
(b) $\alpha \times 10^{-24} \text{ cm}^3$			
Polarizabilidad	0.9	3	4.5

TABLA VI. Constantes físicas utilizadas en los cálculos realizados, tomadas de: (a) Fowler [12] y (b) Ashkroft [17].

5. Discusión final

En la figura 1 se pueden apreciar las gráficas teórica y experimental del corrimiento de la banda M_1 para algunos casos analizados antes. Tanto en el caso en el que se considera a K_0 como constante dieléctrica óptica, como en el que se trata como un parámetro fenomenológico, los resultados teóricos están mucho más cerca de la linealidad que los experimentales. También en este último caso mencionado se puede observar, que el usar la relación (18), es equivalente a la

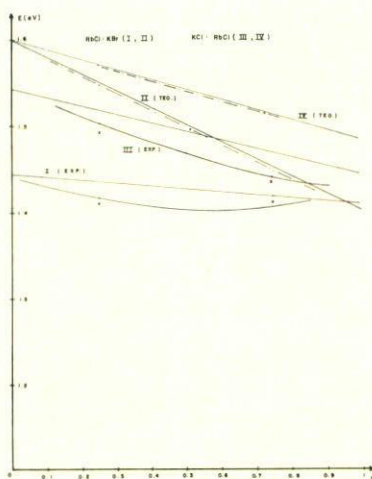


FIGURA 1. Gráfica de los valores teóricos y experimentales de la banda M_1 para el caso del cristal mixto RbCl:KBr, según los resultados presentados en la Tabla IV y del caso del cristal mixto KCl:RbCl, según los resultados presentados en la Tabla V.

utilización de la relación empírica de Mollwo-Ivey para la banda M_1

$$\Delta E = 14a^{-1.84}. \quad (19)$$

Así, el hecho de utilizar una relación cercana a los valores experimentales para ΔE y una relación funcional $a(X)$ que se apega bastante al valor experimental para los mixtos, y obtener sistemáticamente valores similares a los otros casos para δE del orden de meV, teniéndose en general valores experimentales de decenas de eV, nos puede llevar a concluir que hay un efecto importante que no se ha tomado en cuenta, como en el caso de los Centros F [5]. Este efecto puede deberse a los defectos formados en los cristales mixtos. En forma simplificada podríamos decir que hay un campo de esfuerzos alrededor del Centro F_2 (o Centro F), sin dirección privilegiada que perturba a los niveles del Centro. Es razonable que este campo de esfuerzos aumente conforme los cristales se crecen con mayor proporción de los componentes mixtos. Así, empíricamente el efecto perturbativo podría proponerse como:

$$\Delta E_p = dX(1 - X) \quad (20)$$

y

$$\Delta E = \Delta E(X) + \Delta E_p, \quad (21)$$

para proporcionarnos los valores típicos de δE . Tanto del Centro F_2 como del Centro F , un valor apropiado para d es 0.1 eV. Una relación semiempírica tal como (20), podría ser útil para conocer las posibles bandas de absorción de otras bandas del F_2 , tal como la banda M_2 , o bandas de otros defectos moleculares en mixtos, como el $F-U_2$ [10], o el F_2^+ . Para estos casos no se conocen resultados experimentales en cristales mixtos. Para el Centro F_2^+ , el conocimiento de las bandas ópticas en cristales mixtos podría ser de mucho interés práctico, ya que se utiliza para láseres de infrarrojo. Así, la posibilidad de cambiar la longitud de onda de la banda óptica, según los componentes de un cristal mixto, puede ser de mucho interés. Por lo tanto, el trabajo experimental en estos cristales, tal como su crecimiento con la menor cantidad posible de defectos es muy importante. También, una mayor cantidad de datos experimentales en cristales mixtos coloreados puede ser de interés, así como conocer experimentalmente el comportamiento de la constante dieléctrica óptica.

Para terminar, mencionaremos que las investigaciones de Kamiyoshi *et al.* [11], respecto a la constante dieléctrica estática en cristales mixtos de halogenuros alcalinos, corroboran las proposiciones antes mencionadas, ya que el comportamiento de esta constante conforme varía la Concentración, lo encuentran influenciado considerablemente por esfuerzos locales, y para minimizar este efecto en sus mediciones siguen un tratamiento térmico descrito en su trabajo [11]. También utilizaron la técnica de realizar diversas mediciones después de que los cristales mixtos eran pulverizados y recristalizados por calentamiento [11]. Así, procedimientos equivalentes podrían utilizarse para estudiar a halogenuros alcalinos cristalinos mixtos coloreados.

Agradecimientos

Agradecemos a los Dres. Antonio Díaz Góngora, Rolando Jiménez y Gustavo Vázquez sus útiles discusiones en relación al tema de este trabajo.

Referencias

1. R.T. Gnadinger, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 323.
2. A. Smakula, N.C. Maynard y A. Rapucci, *Phys. Rev.* **130** (1963) 113.
3. P. Veeresham, U.V. Subba Rao y V. Hari Babu, *J. Cryst. Growth* **52** (1981) 943.
4. K. Asami y M. Ishiguro, *Phys. Rev.* **B34** (1986) 4199.
5. R. Rodríguez y E. Camarillo, *Rev. Mex. Fis.* **33** (1978), 478.
6. R. Rodríguez y C. Ruíz-Mejía, *J. Phys. Chem. of Solids*. (En prensa)
7. L. Vegard y M. Schjelderup, *Z. Phys.* **18** (1917) 93.
8. R. Herman, M.C. Wallis y R.F. Wallis, *Phys. Rev.* **103** (1958) 87.
9. M.A. Aegerter y F. Luty, *Phys. Stat. Sol. (b)* **43** (1971) 245.
10. R. Rodríguez, G. Vázquez y G.A. Díaz, *Rev. Mex. Fis.* **30** (1984) 675.
11. K. Kamiyoshi y J. Nigora, *Phys. Stat. Sol. (a)* **6** (1971) 223.

12. W.B. Fowler, *Physics of Color Centers*, Academic Press, EUA. (1968).
13. N.S. Bakhvalov, *Numerical Methods*, Mir Publishers, Moscú, URSS (1977).
14. T.E. Sharp, *Atomic Data* **2** (1971) 119.
15. D.D. Slable y H.A. Kinsty, *Acta Cryst.* **21** (1966) 1013.
16. B.S. Gourry y F.J. Adrian, *Solid State Phys.* **10** (1960) 127.
17. N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt Rinchart and Winston (1976).

Abstract. We used the diatomic molecule of hydrogen to model the shifting in the band M_1 of the F_2 center in alkali halide mixtures. We considered optical dielectric constants depending on the concentrations of the components of the mixed crystal. It was found that the resulting theoretical values are lower than the experimental values. We suggest that this difference is due to a greater density of dislocations than there is in mixed crystals.