

# El centro F como tema útil en los cursos de física moderna\*

R. Rodríguez, E. Muñoz,  
M. Barboza, R. Pérez y A. Clark

*Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora  
Apartado postal 5-088, 83190 Hermosillo, Sonora*

(Recibido el 16 de julio de 1990; aceptado el 19 de febrero de 1991)

**Resumen.** Se propone la introducción del tema del centro F en los cursos de física moderna de no-graduados y graduados en programas de física, química y ciencia de materiales. Como un ejemplo, con cierto grado de complejidad, se estudia, tanto teórica como experimentalmente, la solución del problema de la banda F de absorción en cristales mixtos de  $\text{KCl}_{(1-x)}\text{KBr}_x$ . El tratamiento determina, como casos particulares, las propiedades de los cristales KCl para  $x = 0$  y KBr para  $x = 1$ .

PACS: 75.50.-w; 01.55.+b; 01.90.+g

## 1. Introducción

Este trabajo tiene el propósito de plantear la posibilidad de cubrir en los cursos de física moderna, un tema de la física del estado sólido: el centro F, lo cual puede tener varias ventajas desde el punto de vista didáctico, debido a que puede facilitar la comprensión de varios conceptos básicos introductorios de la física de defectos en estado sólido y de la mecánica cuántica.

La evidencia experimental indica que el centro F consiste en un electrón atrapado en una región de un cristal iónico definida por un ión negativo faltante. El defecto se forma exponiendo el cristal a radiaciones y se evidencia a través de sus propiedades ópticas, de tal manera que un cristal iónico, tal como el NaCl, que normalmente es transparente, se torna amarillo cuando tiene centros F. El nombre del defecto se debe a que fue denominado como "Farben Center" en Alemania, por un grupo de Gotinga que lo estudió con detalle. ("Farbe" en alemán significa color).

En seguida proponemos las ventajas que puede tener su enseñanza, según lo mencionamos antes. Posteriormente a su enumeración las discutiremos con más detalle.

1. Se considera que el centro F juega el mismo papel en la física del estado sólido, que el átomo de hidrógeno en la física atómica [1].

---

\*Trabajo parcialmente apoyado por DGICSA-SEP, CONACYT (México) y TWAS (Italia).

2. Al ser un centro de electrón sencillo en el mismo sentido que el átomo de hidrógeno, su conocimiento es una forma natural de introducción al estado sólido.
3. Históricamente el centro F fue uno de los defectos que primero se estudiaron de manera sistemática, lográndose una amplia información experimental y teórica.
4. Los modelos teóricos sencillos del centro F son una excelente introducción a problemas básicos de la mecánica cuántica, tal como el de una partícula atrapada en un pozo de potencial. A un nivel más avanzado es un excelente ejemplo de la aplicación de métodos aproximados, tal como el método variacional de la mecánica cuántica.

En relación al primer punto, físicamente la analogía del centro F con el átomo de hidrógeno reside en el hecho de que el centro consiste de un electrón atrapado en la vecindad de una carga positiva, debido a la vacancia de ión negativo. Metodológicamente, la analogía consiste en que el estudio de este electrón y su interacción con el resto del cristal facilita la comprensión de situaciones más complicadas (defectos más complejos), en forma similar a como el estudio del átomo de hidrógeno es fundamental para comprender átomos más complejos.

Respecto al segundo punto podemos señalar que, en general, en los cursos introductorios de física moderna, se trata el tema de la física del estado sólido mencionando el caso del movimiento de electrones en metales. El ampliar un poco más el panorama considerando a los aislantes y en particular a los cristales iónicos que tienen una simetría simple, permite introducir varios conceptos tales como los tipos de amarre en sólidos, el amarre iónico, los tipos de defectos como las vacancias, átomos intersticiales y centros de color como el centro F y sus propiedades ópticas, y la absorción de luz al saltar el electrón entre dos niveles, su característica de un espectro de bandas anchas debido a la vibración de los átomos vecinos al centro, situación que lo diferencia del caso atómico en que el espectro se forma por líneas. Finalmente, para completar un panorama breve, se podría mencionar a los semiconductores como complemento a los aislantes y conductores y su importancia en aplicaciones tecnológicas a través de sus defectos.

Respecto al tercer punto, el orden cronológico del desarrollo de los conocimientos científicos que van de menor a mayor información cada vez más compleja, puede ser una pauta para la presentación en forma didáctica de un tema. Esta situación es muy clara en cursos introductorios de mecánica cuántica, que inician con la cuantización de Planck de la radiación, pasando por el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno, la dualidad onda-partícula de De Broglie y finalmente la ecuación de Schrödinger. En otras ramas de la física moderna y en particular del estado sólido introductorio, esta relación biunívoca entre desarrollo histórico y presentación didáctica es menos frecuente. Así, en particular, destacar la importancia que juegan los defectos en estado sólido y desarrollar el concepto a través de su desenvolvimiento histórico puede ser útil, ya que el centro F inicia en gran parte la física del estado sólido; anteriormente a su estudio, esta ciencia era únicamente cristalografía. El estudio del centro F y en general de los centros de color se ha realizado a lo largo de lo que



va del siglo XX y seguramente se seguirá estudiando en esta última década de los años 90.

La coloración de un cristal iónico producida por bombardeo con rayos catódicos fue observada y registrada por el Prof. Goldstein [2] en 1894. Un esfuerzo experimental sistemático de entender el centro de color fue realizado en el laboratorio del Profr. Pohl, en Gotinga, a partir de 1925. Sus esfuerzos se extendieron por un periodo de 10 años y dieron por resultado material básico para la física del estado sólido [3]. Su trabajo resultó muy útil, entre otras cosas para la realización de fósforos de infrarrojo en la Segunda Guerra Mundial y posteriormente para el desarrollo de la tecnología de semiconductores en la electrónica moderna.

Actualmente, los centros de color siguen siendo un campo de estudio por sus recientes aplicaciones en láseres de infrarrojo y para almacenamiento de información [4]. Teóricamente han sido sujeto de aplicación de las técnicas de la mecánica cuántica desde los inicios de esta rama de la física. Enseguida daremos algunos conceptos introductorios, en relación al centro F.

Iniciaremos suponiendo que el alumno tiene conocimientos respecto al átomo de hidrógeno, átomos de muchos electrones y de las fuerzas que forman a una molécula diatómica. Entonces la siguiente etapa en este orden de conocimiento es considerar la agregación de átomos que pueden formar un sólido. Nos interesan los agregados que se arreglan en forma cristalina, los cuales, según su simetría, se pueden considerar como repeticiones infinitas de una celda unitaria de forma definida. Hay catorce tipos de estas formas, denominadas, celdas de Bravais. Un ejemplo de estas celdas es el arreglo de los átomos formando un cubo, en el cual átomos que forman el sólido están en los vértices; otro ejemplo es un arreglo hexagonal.

Nuestro interés aquí es presentar un tema diferente a los temas en cursos introductorios que pretenden dar una idea de la física del estado sólido a través de un curso de física moderna. En general los tópicos que se tocan son teoría de bandas, el gas de electrones en un metal y algunos detalles sobre semiconductores, dado su interés tecnológico.

El tema introducido aquí está relacionado con aislantes, tal como es un cristal formado a través del amarre coulombiano al estar arreglado por iones atómicos que en forma alternada tienen signos positivos y negativos, como el NaCl. Esta clase de material tiene una celda unitaria de tipo cúbico, donde los iones de un signo están colocados en los vértices y centros de las caras del cubo.

Nos interesa enfatizar que el estado sólido contiene el estudio de los defectos en el material. Un defecto es un sistema físico que interrumpe la repetición infinita de una celda única que tiene un tipo conocido de átomos. Un defecto típico es un átomo extraño, distinto a los átomos que forman el cristal, esto es una impureza y puede sustituir a uno de los átomos normales en la red cristalina. Otro defecto que existe en todos los sólidos es una vacancia, que es la falta de un átomo. En un sólido iónico, tal como el NaCl, una vacancia de ión negativo es el sitio donde falta un  $\text{Cl}^-$ . Otro defecto es el centro F que esta formado por una vacancia de ión negativo con un electrón atrapado.

En la familia de los halogenuros alcalinos, al cual pertenece el NaCl, se pueden formar centros F. Cuando esto ocurre, el material que normalmente es transparente

a la luz visible, pierde su transparencia y toma un color característico; entonces el centro F es un electrón atrapado en una región de carga positiva. Si enviamos luz de ciertas frecuencias, el electrón del centro F puede cambiar de un estado cuántico a otro y tener un espectro de absorción óptico, análogamente a un átomo de hidrógeno. Sin embargo a diferencia del átomo de hidrógeno, no observamos líneas sino bandas, lo cual se debe a que la frontera de la región en donde está atrapado el electrón está en movimiento por las vibraciones de los átomos de la red.

Estas vibraciones son intrínsecas al sólido y dependen de la temperatura. Si ésta es muy baja, las vibraciones son pequeñas, y aun en el cero absoluto existe la vibración denominada de punto cero, si consideramos a los átomos vibrando según un oscilador armónico. A la banda que resulta del salto del electrón del centro F desde el estado base al primer estado excitado, se le denomina banda F y su forma es gaussiana; al máximo de esta banda se le identifica como la energía de la diferencia entre los niveles de energía involucrados. En seguida mencionaremos algunos modelos teóricos para el centro F que pueden ser útiles en los cursos de física moderna y que se puede cubrir en la parte de iniciación a la mecánica cuántica. Plantearemos un problema, el cual se puede resolver teóricamente en un nivel introductorio y de manera más elaborada en cursos avanzados con laboratorio.

Una de las evidencias experimentales respecto al centro F en los halogenuros alcalinos del tipo NaCl es la ley de Mollwo-Ivey, la cual establece que la energía de la banda de absorción óptica principal, llamada banda F, sigue una relación del tipo

$$E = \alpha b^{-1.86},$$

donde  $b$  es la distancia entre iones de la red cristalina de los diversos halogenuros alcalinos. Con esta evidencia un modelo para el centro F que inmediatamente se puede proponer es el de un electrón atrapado en un pozo de ancho  $2b$  y paredes infinitas, ya que nos proporciona una relación cercana a la ley de Mollwo-Ivey del tipo [1]

$$E = \alpha b^{-2}.$$

Si se realizan los cálculos en detalle, se encuentran valores cercanos a los experimentales. Así, los modelos del pozo impenetrable o penetrable, cuadrado o esférico son útiles para el centro F y excelentes candidatos para la enseñanza. Una presentación de estos casos y con propósito didáctico puede consultarse en *American Journal of Physics*, en el artículo de Hughes [5].

Otro modelo sencillo resulta cuando se considera al centro F como un átomo de hidrógeno sumergido en un dieléctrico. Los resultados para la banda F se obtienen escalando, con el valor de la constante dieléctrica óptica, la diferencia de energía entre el estado base y el primer estado excitado del átomo de hidrógeno. Los valores son cercanos a los experimentales [6]. En este último modelo se considera al cristal como un dieléctrico continuo. Modelos más elaborados resultan cuando se considera a la vacancia como una cavidad hueca en el dieléctrico continuo, dando lugar a modelos del semicontinuo. En este tipo de modelos se construye un hamiltoniano



con potencial del tipo de pozo esférico en la región de la cavidad, y del tipo coulombiano debido a polarizaciones en la región dieléctrica; este tipo de modelos mejoran los valores teóricos para las energías de la banda F, su resolución se realiza por métodos variacionales considerando en general a funciones de tipo hidrogenoide con parámetro variacional como función de prueba [7]. Otro modelo teórico elaborado, que parte de primeros principios, construye el potencial como una suma de potenciales coulombianos con cargas puntuales de signos alternados. También se utilizan métodos variacionales con funciones de onda de tipo hidrogenoide o de pozo esférico [8].

Los mejores resultados para la banda F se logran con el modelo de ión puntual con corrección, tomando en cuenta el tamaño del ión y utilizando métodos de pseudopotenciales [9].

## 2. Desarrollo teórico

Para ilustrar el uso de los conceptos necesarios en la solución del problema del centro F, escogeremos un caso particular: el cálculo de la banda F de absorción de un cristal mixto  $\text{KCl}_{(1-x)}\text{:KBr}_x$ . Este cristal está formado por la mezcla de dos compuestos, de KCl y KBr, con una concentración molar  $x$  de uno respecto al total. Para propósitos ópticos y con base en medidas de difracción de rayos X [10], el resultado de la mezcla es un cristal nuevo, con la misma estructura tipo NaCl que los originales y con una constante de red dada por

$$a = a_1(1 - x) + a_2x, \quad (1)$$

donde  $a_1$  es la constante de red de KCl y  $a_2$  es la constante de red del KBr. En esta parte es factible presentar en un curso algunos conceptos introductorios de cristalografía.

### 2.A. Nivel introductorio

El problema fundamental del centro F consiste en calcular la banda F de absorción, la cual nos determina el cambio de energía de la transición entre el estado base y el primer estado excitado. Un modelo simple que simula la situación física es el de una partícula atrapada en un pozo de potencial, así que consideraremos al electrón atrapado en un pozo de potencial de paredes infinitas y con una anchura del orden de la constante de red. Usando el resultado de la mecánica cuántica para el pozo tridimensional, obtenemos para la energía de la banda F:

$$\Delta E \equiv E_1 - E_0 = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad (2)$$

donde  $m$  es la masa del electrón,  $E_1$  la energía del estado excitado,  $E_0$  la energía de estado base y  $a$  es la constante de red. El valor teórico determinado por esta relación se puede comparar con valores experimentales para KCl y KBr y se encuentra cierta

$x$	$E_{exp}$	$E$
1	2.049	2.049
0.75	2.100	2.107
0.5	2.165	2.167
0.25	2.230	2.229
0	2.294	2.294

TABLA I. Valores experimentales  $E_{exp}$  de Ref. [11] y valor de la energía de la banda F en KCl en eV ajustado según la fórmula (3) a los valores experimentales  $E_{exp}$  obtenidos a bajas temperaturas [11];  $x$  es la concentración.

discrepancia. Hughes [5] calculó la banda F para todos los halogenuros alcalinos y encontró que en promedio hay acuerdo entre el valor teórico y el experimental si el ancho del pozo es 16% mayor que la constante de red, o sea de ancho  $\gamma a$ , con  $\gamma = 1.16$ .

De esta manera, el problema que nos hemos planteado para los cristales mixtos lo podemos resolver con la siguiente expresión:

$$\Delta E_{mix} \equiv \frac{113}{[\gamma(a_1(1-x) + a_2x)]^2}, \tag{3}$$

con  $\gamma = \gamma_1(1-x) + \gamma_2x$  y  $\gamma_1 = 1.1152$  ajustado al KCl y  $\gamma_2 = 1.125$  al KBr. A  $\gamma$  la denominaremos "factor de distorsión", el cual funciona como parámetro de ajuste. Si  $a_1$  y  $a_2$  están en Å,  $\Delta E_{mix}$  resulta en eV. Introduciendo diversos valores de las concentraciones  $x$ , podemos obtener valores de la energía para cada valor de  $x$ . Estos valores los podemos comparar con resultados experimentales obtenidos recientemente por Asami *et al.* [11]. Se puede apreciar en la Tabla I que hay un buen acuerdo; aunque el modelo es limitado, ilustra su utilidad a nivel didáctico. Una de sus principales limitaciones es el hecho de considerar las paredes impenetrables, ya que en la realidad se puede sacar al electrón con una energía finita [1]. El comportamiento típico de la banda F con la concentración se aprecia en la Fig. 1.

En los cursos de física moderna, se puede usar otro modelo sencillo para el centro F, el cual consiste en considerarlo como un átomo de hidrógeno sumergido en un dieléctrico. Es fácil ver que los valores de la energía del átomo de hidrógeno se escalan por la constante dieléctrica como  $E_n/k_0^2$  y la banda F la podemos obtener con la diferencia

$$\Delta E = \frac{E_{2p} - E_{1s}}{k_0^2}. \tag{4}$$

Podemos intentar resolver el problema de los mixtos, proponiendo relaciones para la constante dieléctrica del mismo tipo que la Ec. (1).

### 2.B Nivel avanzado

En un curso más avanzado se pueden usar modelos más elaborados que ilustran el uso de métodos aproximados de la mecánica cuántica. Así, se puede trabajar el

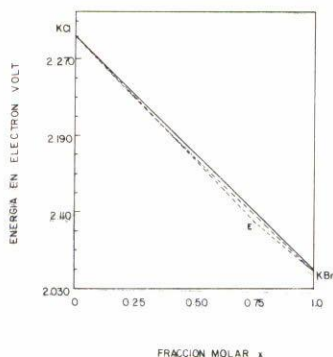


FIGURA 1. Corrimiento de la banda F en un cristal mixto  $\text{KCl}_{(1-x)}\text{KBr}_x$  como función de la concentración  $x$ . Se presentan los valores experimentales de Asami *et al.* [11] (curva punteada) y los obtenidos por la expresión (3) (curva llena).

mismo problema de la banda F de absorción con un modelo del semicontinuo [7]. Este tipo de modelos consideran al electrón atrapado en una cavidad vacía (cavidad de Jost), representada por un pozo de potencial finito y el resto del cristal se considera un medio dieléctrico continuo, polarizable a través de la carga electrónica. Hay varios modelos del tipo semicontinuo que difieren en algunos detalles, recientemente [12] se han usado los modelos de Simpson y Krumhansl-Schwarz, para estudiar el problema de la banda F en mixtos. Aquí, para propósitos ilustrativos usaremos el modelo de Fowler [13] para atacar este mismo problema.

Partiremos planteando el hamiltoniano de la siguiente forma:

a) Dentro de la cavidad de radio  $R$ :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0 \quad (r < R), \quad (5)$$

b) Fuera de la cavidad:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e^2}{k_0 r} \quad (r > R), \quad (6)$$

con  $m^*$  masa efectiva y  $k_0$  constante dieléctrica óptica;  $V_0$  que determina la profundidad del pozo, se obtiene por

$$V_0 = -\frac{\alpha_m}{b} + \chi + W. \quad (7)$$

El primer término es la suma de las interacciones coulombianas entre el electrón y todas las cargas de los iones de la red (energía de Madelung). La suma tiene como parámetros a la distancia inter-iónica  $b$  y converge al valor  $\alpha_m$  (la constante de Madelung),  $\chi$  es la afinidad electrónica y  $W$  es la contribución de las polarizaciones



interna y externa de la pared de la cavidad.  $W$  se obtiene por consideraciones electrostáticas [7]:

$$W = \frac{1}{2R} \left(1 - \frac{1}{k_0}\right) + \left(\frac{1}{k_0} - \frac{1}{k}\right) \int_R^\infty \frac{q(r)}{r^2} dr, \quad (8)$$

donde  $k$  es la constante dieléctrica estática y  $q(r)$  es la carga del electrón de la fracción de la función de onda fuera de una esfera de radio  $r$ :

$$q(r) = \int_r^\infty |\psi(s)|^2 d^3s. \quad (9)$$

Esto significa que se requerirá utilizar un método autoconsistente para obtener la función de onda. Así, el problema lo podemos atacar por el método variacional, proponiendo funciones del tipo hidrogenoide para los estados base y excitado como

$$\psi_{1s} = A(1 + \alpha r)e^{-\alpha r} \quad (10)$$

y

$$\psi_{2p} = B e^{-\beta r} \cos \theta. \quad (11)$$

La normalización de estas funciones nos determinan  $A$  y  $B$ .

Para el estado base el método de solución es

$$E_{1s} = \left\langle \psi_{1s} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \psi_{1s} \right\rangle_i + \left\langle \psi_{1s} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m^*} \right| \psi_{1s} \right\rangle_e + V_0 \langle \psi_{1s} | \psi_{1s} \rangle_i - \frac{e^2}{k_0} \left\langle \psi_{1s} \left| \frac{1}{r} \right| \psi_{1s} \right\rangle_e, \quad (12)$$

donde  $i$  corresponde a la región  $r < R$  y  $e$  a la región  $r > R$  y las integraciones van de 0 a  $R$  y de  $R$  a  $\infty$  respectivamente. En la misma forma se puede calcular el estado  $2p$ . Para realizar los cálculos necesitaremos auxiliarnos de los métodos numéricos y la computación. La comparación de los resultados teóricos con valores experimentales obtenidos en el laboratorio sería un ejercicio completo para un curso avanzado. En seguida proponemos la realización del experimento.

### 3. Resultados teóricos y experimentales

En un nivel avanzado, como un ejercicio de investigación y si las condiciones lo permiten, se puede obtener la banda F experimental, para lo cual se requiere una muestra cristalina, una fuente de radiación para colorear y un espectrofotómetro. Es conveniente conseguir en una casa comercial cristales con tres o cuatro concentraciones, de los cuales puedan cortarse laminitas de aproximadamente un milímetro



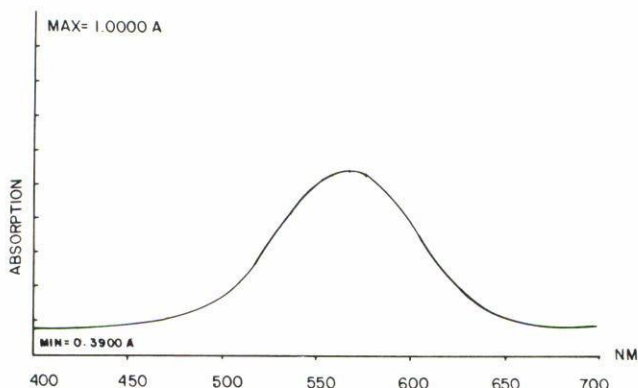


FIGURA 2. Espectro de absorción típico para KCl coloreado a temperatura ambiente, donde se observa la banda F. El pico máximo determina la energía  $E$  de esta banda.

de espesor y  $1 \text{ cm}^2$  de área máximo. Estas laminitas se pueden colorear y blanquear repetidamente y usarlas en varias ocasiones. Como fuente de radiación se pueden usar rayos X suaves [14], tal como los obtenidos con el equipo de enseñanza Tel-X-Ometer.

En la Fig. 2 se puede apreciar el espectro típico para el KCl. El pico máximo determina la energía de la banda F; la anchura de la curva se debe al efecto de las vibraciones de los iones de la red que rodean al centro F.

Para comparar los resultados teóricos con los valores experimentales, se procede a realizar el cálculo desarrollando la Eq. (12), lo cual determina  $E_{1s}(\alpha)$ . Para encontrar el valor de  $\alpha$  que minimiza la energía se inicia con un valor de prueba para el método autoconsistente y se resuelve por métodos numéricos la ecuación  $\partial E_{1s}(\alpha)/\partial \alpha \equiv 0$ , con la cual se determina  $\alpha$  y por lo tanto el valor de  $E_{1s}$  usando la Eq. (12). Un procedimiento similar se sigue para el estado excitado  $E_{2p}$ .

Para realizar los cálculos se utilizan los valores conocidos de las constantes involucradas. En general, en cálculos de este tipo se usan para  $R$  valores obtenidos por consideraciones de balance de fuerzas entre los iones alrededor del centro F, sin embargo, los resultados para la banda F difieren ligeramente de los experimentales [12]. Aquí, siguiendo a Bermudez [15], ajustaremos los valores teóricos a los experimentales, utilizando como parámetros de ajuste a  $R$  y  $m^*$ , siempre que prevalezcan los criterios físicos:  $R$  debe estar en la vecindad del valor de la distancia interiónica y  $m^* < 1$  (para el NaCl, Fowler [13] utiliza  $m^* = 0.6$ ). Teniendo planteado el procedimiento teórico, es conveniente realizar el experimento y obtener los valores de la banda F para diversas concentraciones del  $\text{KCl}_{(1-x)}:\text{KBr}_x$ . Los detalles para la realización del experimento se dan a continuación.

Para colorear se utilizó una fuente de rayos X (Tel-X-Ometer 80) con una corriente de  $50 \mu\text{A}$  y un voltaje de 30 kvolts, el ánodo es de cobre y produce un haz de rayos X de longitud de onda igual a  $0.154 \times 10^{-9} \text{ m}$  los cristales que se utilizaron son aproximadamente de  $0.5 \times 0.5 \text{ cm}^2$  de área y se envolvieron en papel aluminio para evitar el blanqueo; de esta forma se colocan directamente en el orificio en donde

$x$	$E_{exp}$	$E_I$	$E_{II}$	$E_{III}$
1	1.988	1.989	1.988	1.986
0.715	2.023	2.049	2.047	2.043
0.485	2.062	2.01	2.099	2.094
0.295	2.113	2.144	2.145	2.140
0.136	2.166	2.183	2.184	2.182
0	2.218	2.218	2.219	2.20

TABLA II.  $E_{exp}$  Valores experimentales en eV de la banda F en  $KCl_{(1-x)}:KBr_x$  obtenidos por nosotros, y valores teóricos  $E_I, E_{II}, E_{III}$  en eV obtenidos usando el modelo de Fowler [13] y ajustando con distintas parejas de radios de la cavidad  $R$  y las masas efectivas  $m^*$ , según los datos señalados como I, II y III en la tabla III.

	$R_1$	$R_2$	$m_1^*$	$m_2^*$
I	4.00	4.22	0.52	0.72
II	4.21	4.44	0.69	0.87
III	4.42	4.61	0.79	0.97

TABLA III. Parejas de datos ajustados para el radio de la cavidad  $R$  y la masa efectiva  $m^*$ . Para el ajuste se considera  $R_1/R_2 = a_1/a_2$ . El subíndice 1 es para el KCl y el subíndice 2 para el KBr.

	$a$	$\alpha$	$K_0$	$K$
KCl	6.2931	-0.0077	2.13	4.80
KBr	6.5966	-0.0044	2.33	4.87

TABLA IV. Constantes  $c$  utilizadas en los cálculos:  $a$  constante de red en Å,  $\chi$  afinidades electrónicas en unidades atómicas,  $K_0$  constante dieléctrica óptica y  $K$  constante dieléctrica estática. La constante de Madelung  $\alpha_m = 1.7476$ . Tomados de Refs. [17] y [18].

emergen los rayos X. El tiempo de irradiación fue de 100 min para cada cristal con diferente concentración.

Para obtener los espectros de absorción se utilizó un espectrofotómetro de doble haz Perkin Elmer UV/VIS y se trabajó a temperatura ambiente. Conocidos los valores experimentales se ajustan  $m^*$  y  $R$ . También se pueden ajustar estos valores usando valores experimentales de Asami [11]. En la Tabla II se presentan los valores de la banda F obtenidos experimentalmente; también se muestran los valores teóricos obtenidos según el modelo de Fowler. En la Tabla III se listan los valores de las constantes utilizadas incluyendo los de  $R$  y  $m^*$  ajustados. En la Tabla IV se listan las otras constantes  $c$  utilizadas. Las relaciones entre los parámetros de las componentes del cristal mixto y la concentración  $x$  fueron del tipo ley de Vegard:

$$c = c_1(1 - x) + c_2x,$$

donde  $c_1$  corresponde a KCl y  $c_2$  a KBr.

#### 4. Conclusiones

Se puede observar un buen acuerdo entre resultados teóricos y experimentales para los modelos presentados aquí. El tratamiento del centro F presentado, trata de



ilustrar lo conveniente de este tema en cursos de física moderna. Con base en esta presentación, su utilidad la podemos resumir como sigue:

a) En el estudio de los conceptos de estado sólido que necesariamente se hace en los cursos de física moderna, el planteamiento del defecto más simple, homólogo del átomo de hidrógeno, puede ser ilustrativo.

b) El centro F se puede introducir antes de considerar los conceptos de estado sólido en sí, tratándolo como un ejemplo de la aplicación de los resultados del pozo de potencial infinito y del átomo de hidrógeno.

c) Ya dentro del tema de estado sólido, habiendo introducido los conceptos de estructura cristalina, energía de Madelung y bandas de energía, en donde la masa efectiva  $m^*$  concentra de una manera simple la información del efecto del potencial periódico de la red sobre el electrón, se puede resolver el problema del centro F como un ejemplo más de un método variacional; además del átomo de helio que en general se estudia. Como corolario, diremos que en el tratamiento que se hace del ión molecular de hidrógeno y la molécula diatómica  $H_2$ , se puede mencionar que las transiciones electrónicas de los defectos formados por un centro F en la vecindad de una vacancia y por dos centros F contiguos, se pueden modelar usando los resultados de estas dos moléculas sumergidas en el medio dieléctrico, correspondiente al cristal en que se encuentran.

Finalmente, mencionaremos que el centro F sigue siendo objeto de estudio para el desarrollo de láseres de infrarrojo [4], y se ha detectado en materiales novedosos como son los superconductores de alta temperatura [16].

### Agradecimientos

Agradecemos al Dr. Héctor Riveros y al Sr. Ricardo Guerrero, del Instituto de Física de la UNAM, el proceso del crecimiento de los cristales utilizados.

### Referencias

1. F. Brown, *Física de los Sólidos*, Edit. Reverté, Barcelona (1970).
2. E. Goldstein, *Sitz Berliner Acad. Wiss.* (1894); *Z. Instrument Runde* **16** (1896) 211.
3. R.W. Pohl, *Proc. Phys. Soc.*, (London) **49** (1937) 3.
4. L.F. Mollenauer, *Laser Handbook*, V.4, Edit. M. Bass, North Holland Amsterdam, (1985).
5. G.P. Hughes, *Am. J. Phys.* **45** (1977) 848.
6. R. Rodríguez y E. Camarillo, *Rev. Mex. Fis.* **33** (1988) 478.
7. A. Clark, M. Barboza, R. Rodríguez y C. Ruíz Mejía, *Rev. Mex. Fis.* **28** (1981) 29.
8. R. Rodríguez, M. Barboza, A. Clark y C. Ruíz Mejía, *Rev. Mex. Fis.* **30** (1984) 629.
9. R. Rodríguez y C. Ruíz Mejía, *Phys. Rev.* **1339** (1989) 11120.
10. R.T. Gnadinger, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 323.
11. K. Asami y M. Ishiguro, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 4199.
12. R. Rodríguez y C. Ruíz Mejía, *J. Phys. Chem Solids* **49** (1988) 505.
13. W.B. Fowler, *Phys. Rev.* **135** (1964) A1725.
14. R. Rodríguez y A. Clark, *Am. J. of Phys.* **55** (1987) 186.
15. V.M. Bermúdez, *Surf. Sci.* **74** (1978) 568.

16. D.W. Cooke, H. Rempp, Z. Fisk, J.L. Smith y M.S. Jahan, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 2287.
17. W.B. Fowler, *Physics of Color Centers*, Academic Press (1968).
18. N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston (1976).

**Abstract.** We propose to include the study of the F center subject as part of the modern physics or solid state course at undergraduate and graduate levels, in the physics, chemistry and materials sciences programs. As an example with a certain degree of difficulty we discuss, theoretically and experimentally, the absorption band of the F center in mixed  $\text{KCl}_{(1-x)}\text{KBr}_x$  single crystals. The treatment permits determination of the properties of pure KCl and KBr as particular cases when  $x = 0$  and  $x = 1$ , respectively.