

混合卤化物中的极化子与双极化子*

魏建华 解士杰 梅良模

(山东大学物理系, 济南 250100)

(2000 年 3 月 14 日收到, 2000 年 5 月 18 日收到修改稿)

应用紧束缚双带模型对混合卤化物的电荷掺杂性质进行了计算, 发现单电荷掺杂在混合卤化物中形成极化子, 双电荷掺杂则形成稳定的双极化子; 单体的长度和界面耦合都对极化子和双极化子的产生和稳定性有影响. 混合卤化物的单体对掺杂电荷具有选择性, 电子-电子相互作用并不能使形成双极化子的两个同号电荷相互排斥而形成两个单极化子. 在具有电荷自发转移的材料中, 混合卤化物单体对掺杂电荷没有像其他混合卤化物一样的选择性, 掺杂电荷的定域位置取决于两种单体对该电荷的束缚能力.

关键词: 混合卤化物, 极化子, 电荷约束

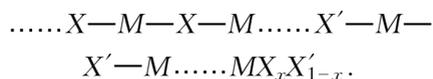
PACC: 7145, 7138, 7130

1 引 言

极化子和双极化子是高分子聚合物、共聚物和金属卤化物等低维体系中的重要掺杂和光诱导局域缺陷态, 对材料的物理和化学特性有重要的影响. 高分子聚合物中的极化子和双极化子特性已经有了系统的研究, 但它们在共聚物和金属卤化物中性质还不是很清楚. 金属卤化物是具有广泛应用前景和重要学术研究价值的一类新型功能材料, 主要由金属 M ($= Ni, Pd, Pt$) 和卤族元素 X ($= Cl, Br, I$) 交替排列形成一维的主链, 主链在三维空间平行排列, 由不同形式的配合基相互连接, 典型材料如 $[P(en)_2] [P(en)_2X_2] [ClO_4]$ ($X = Cl, Br, I; en = C_2H_2N_2$). MX 化合物代表新一类可明显调节的准一维单晶系统, 为实验上研究极化子和双极化子提供了可能性; 通过改变组分 M 或 X , 这类材料具有可控的物理特性; 从电荷密度波 (CDW) 到反铁磁相或自旋密度波 (SDW) 相等^[1-10]. 室温下这类材料电导率可从典型的绝缘体到典型的小能隙半导体, 其光谱和磁性也在很宽的范围内发生变化. 通过化学合成或结构调节就可以导致丰富的基态和激发态正是 MX 化合物优于其他低维化合物的地方. 对 MX 这类材料所表现出的低维、混价、强电子-声子、电子-电子相互作用及它们之间竞争的研究需要深化和发展多

体理论, 这对于验证和发展当前一维结构的各种理论具有十分重要的意义^[10-18].

MX 化合物除了具有低维、混价、强的电子-声子和电子-电子相互作用等性质外, 易调节是其突出特点之一, 由两种金属卤化物形成混合金属卤化物是其中很有意义的一种调节方法^[19-21]. 混合金属卤化物主要有三种: MMX , $M_xM'_{1-x}X$ 和 $MX_xX'_{1-x}$, 其中混合卤素 MX 化合物的基本构型如下:



两种 MX 单体材料形成混合卤素 MX 化合物后, 其界面处发生相互作用, 导致体系性质发生变化, 这种变化既不同于 MX 也不同于单体 MX' , 一般有两种情况, 一是两单体保持各自的性质不变, 只在耦合界面处出现了一些过渡性特征; 另一种更有意义的情况是组成混合卤素 MX 化合物两种单体发生“化学反应”, 出现电荷在两种单体之间的自发转移现象^[22]. 这种不需要光激发而自发产生的电荷转移十分类似于半导体中的 p-n 结, 在理论和实用上都具有十分重要的意义.

对 MX 化合物中的极化子和双极化子已有一些研究工作^[1, 2], 但它们在混合卤化物中的性质人们知之甚少. 与 MX 化合物单链相比, 混合卤化物具有很多特殊的性质^[19-21], 因此我们认为, 混合卤

* 国家自然科学基金(批准号: 59871024)资助的课题.

化物中的极化子和双极化子会有一些不同于在 MX 化合物单链的特点. 本文由此出发, 研究由电荷掺杂激发的极化子和双极化子在混合卤化物中的性质.

2 模型与计算

对每种单体链, 采用 $3/4$ 占据的双能带模型^[1, 2] 对 $PtX_xX'_{1-x}$ ($X = Cl, Br; X' = Br, I$) 混合卤化物进行计算, 系统的 Hamiltonian 量如下:

$$H = \sum_i H_i + H_{1-2}, \quad (1)$$

其中 H_i 为单体 i ($i = 1, 2$) 的 Hamiltonian 量;

$$H_i = \sum_{n,s} [-t_{0,im} + \alpha_{i,m}(u_{i,m+1} - u_{i,m})] \cdot (C_{i,m,s}^+ C_{i,m+1,s} + \text{H.c.}) + \sum_{n,s} [(-1)^n e_{0,im} - \gamma_{i,m}(u_{i,m+1} - u_{i,m-1})] C_{i,m,s}^+ C_{i,m,s} + \frac{1}{2} \sum_n k_{i,m}(u_{i,m+1} - u_{i,m})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n,s} U_{i,m} C_{i,m,s}^+ C_{i,m,s} C_{i,m-r,s}^+ C_{i,m-r,s}, \quad (2)$$

其中 t_0 为均匀晶格结构最近邻格点的电子跃迁积分; M, X 原子分别占据偶、奇格点, 其基团的在位能相差 $2e_0$; α, γ ($\gamma = \gamma_M, \gamma_N$) 分别为格点上和格点间的电子-声子耦合参量; u_n 为格点相对于均匀结构的偏离; $C_{n,s}^+, C_{n,s}$ 为自旋 s 的电子在格点 n 上的产生和湮没算符; k_{MX} 为 M, X 原子基团间弹性力常数; U_n ($= U_M, U_X$) 为同一格点上相反自旋的电子之间的相互作用强度.

H_{1-2} 反映了两单体之间的耦合. 我们认为, 这种耦合主要发生在两单体的衔接的最近邻原子之间, 在紧束缚近似下, 这种耦合可写为

$$H_{1-2} = \sum_s [-t_{0,c} + \alpha_c(u_{X_c'} - u_{M_c})] [C_{M_c,s}^+ C_{X_c',s} + \text{H.c.}] + \sum_s [e_{0,1} - \gamma_{M_c}(u_{X_c'} - u_{X_c})] C_{M_c,s}^+ C_{M_c,s} - \sum_s e_{0,2} C_{X_c',s}^+ C_{X_c',s} + \frac{1}{2} k_c (u_{X_c'} - u_{M_c})^2 \quad (3)$$

其中各符号的物理意义与单体中类似. 计算中对每一单体, 取各自所对应的参数值, 如表 1 所示.

表 1 PtX 单体的参数值

	t_0/eV	$\alpha/\text{eV/nm}$	e_0/eV	$\beta/\text{eV/nm}$	$k/\text{eV/nm}^2$
PtCl	1.54	23.8	0.924	1.60	391
PtBr	1.30	21.7	0.520	1.52	503
PtI	1.99	26.5	0.398	2.12	719

对于两单体的界面耦合参数取为

$$t_{0,c} = \beta(t_{0,1} + t_{0,2}); \quad \alpha_c = \beta(\alpha_1 + \alpha_2); \quad k_c = \beta(k_{MX,1} + k_{MX,2}), \quad (4)$$

其中 β 为界面耦合因子, 其大小反映了界面耦合作用的强弱. 在一般的研究中, 多取 $\beta = 1/2$.

在 Wannier 轨道 $|n\rangle$ 下, 电子波函数可写为

$$\Psi_{\mu,s} = \sum_n Z_{n,\mu,s} |n\rangle.$$

哈密顿量(1)式的本征方程为

$$[-t_{0,m} + \alpha_n(u_{n+1} - u_n)] Z_{n+1,\mu,s} + [-t_{0,m} + \alpha_n(u_n - u_{n-1})] Z_{n-1,\mu,s} + [(-1)^n e_{0,m} - \gamma_n(u_{n+1} - u_{n-1})] Z_{n,\mu,s} + U_n \langle C_{n,r,s}^+ C_{n,r,s} \rangle Z_{n,\mu,s} = \epsilon_{\mu} Z_{n,\mu,s}. \quad (5)$$

由系统的总能量最小, 得平衡条件:

$$u_n = \frac{1}{2}(u_{n+1} + u_{n-1}) - \frac{\alpha_n}{k_{MX,m}} \sum_{\mu,s}' Z_{n,\mu,s} \cdot (Z_{n-1,\mu,s} - Z_{n+1,\mu,s}) + \frac{\gamma_{n+1}}{2k_{MX,m}} \cdot \sum_{\mu,s} (Z_{n+1,\mu,s} Z_{n+1,\mu,s} + Z_{n-1,\mu,s} Z_{n-1,\mu,s}), \quad (6)$$

其中 $\epsilon_{\mu,s}$ 为电子本征能量, $\sum_{\mu,s}'$ 为对电子的占据态求和.

联立方程(5)和(6), 使系统的总能量达到极小, 即可获得对应某一静态位形的电子能谱、电子波函数和系统总能量.

3 结果与讨论

为消除边界的影响, 计算中采用周期性边界条件. 刚开始时, 取界面耦合因子 $\beta = 0.5$, 总链长 $N_T = 160$, 计算发现在 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中掺杂一个负电荷形成的是负电极化子, 定域在 $PtCl$ 单体中, 掺杂一个正电荷形成的是正电极化子, 定域在 PtI 单体中, 如图 1 所示. 如果掺杂两个负电荷, 则形成一个定域在 $PtCl$ 单体中的负电双极化子, 掺杂两个正电荷, 形成一个定域在 PtI 单体中的正电双极化子, 它们的产生能依次为 0.499, 0.558, 0.56, 0.734 eV. 产生能是系统形成一个元激发所需要的能量, 其具体定义为

$$E^{cr} = E_T^d - \mu N_c^d - E_T^u + \mu N_c^u, \quad (7)$$

其中 E_T^u 和 E_T^d 分别为电荷掺杂前后系统的总能量; 化学势 $\mu = (e^v + e^c)/2$, 而 e^v (e^c) 为价带顶(导带

底的能级; $N_e^y(N_e^d)$ 为系统在掺杂前后系统的 π 电子总数.

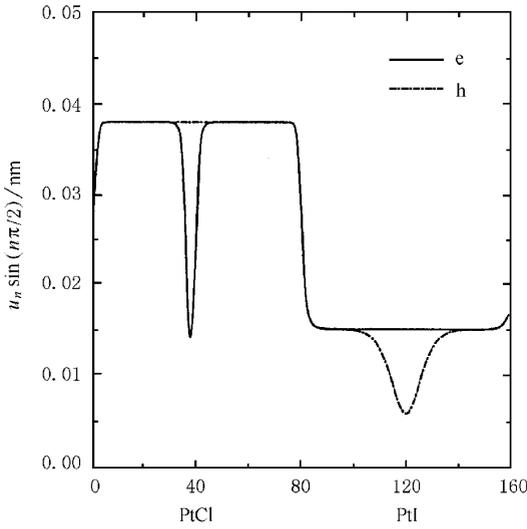


图 1 混合卤化物 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 的单电荷掺杂时的位形 可以看到单体对掺杂电荷具有选择性

上述结果表明双极化子要比两个单极化子稳定,对它们的产生能的比较也可以看到这一点.同时可以看到 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中不同的单体 PtCl 和 PtI 对电荷具有选择性, PtCl 倾向于束缚负电荷,而 PtI 倾向于束缚正电荷.但是如果换成另一种混合卤化物材料,结果就会有所不同,例如对 $PtCl_{0.5}Br_{0.5}$ 计算发现在同样的界面耦合因子和总链长下,系统掺杂一个负电荷形成的是负电极化子,定域在 PtBr 单体中,掺杂一个正电荷形成的是正电极化子,定域在 PtCl 单体中,如图 2 所示.如果掺杂两个负电荷,则形成一个负电双极化子,定域在 PtBr 单体中,掺杂两个正电荷,则形成一个正电双极化子,定域在 Pt-Cl 单体中,它们的产生能依次为 0.56, 0.633, 0.813, 0.737 eV.

比较上述结果,可以发现同一种单体在不同的混合卤化物里对电荷有不同的选择能力,以 PtCl 为例,在 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中,它倾向于束缚负电荷,而在 $Pt-Cl_{0.5}Br_{0.5}$ 中,则倾向于束缚正电荷.这是因为在混合卤化物中,一种材料对某种电荷束缚与否取决于这种材料束缚该电荷后系统总能量的变化,而这种变化包括两个方面:一是电子的总能量变化 ΔE_e ;二是弹性能的变化 ΔE_k . 最终的稳定态应该是这两项之和为最低的状态.在 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中, PtCl 束缚负电荷使得系统的总能量最低,所以是最稳定态,但在 $Pt-Cl_{0.5}Br_{0.5}$ 中,计算发现 PtCl 束缚负电荷是系统的一

种亚稳态,在最稳态它倾向于束缚正电荷.混合卤化物中单体对掺杂电荷的选择性,一方面说明了掺杂后混合卤化物是一个多稳态的系统;另一方面也决定了系统处于能量最低态时极化子和双极化子的位置.由此出发,就可以进一步研究各种因素对混合卤化物中极化子和双极化子的影响.

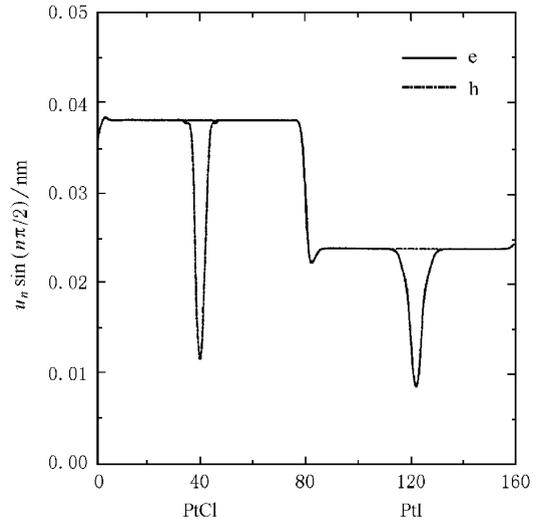


图 2 混合卤化物 $PtCl_{0.5}Br_{0.5}$ 单电荷掺杂时的位形 可以看到单体在不同的混合卤化物中对掺杂电荷具有不同的选择性

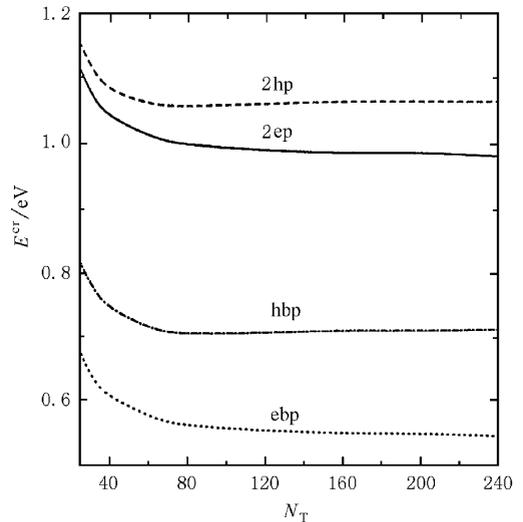


图 3 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中极化子和双极化子的产生能随系统的总链长 N_T 的变化

图 3 给出 $PtCl_{0.5}I_{0.5}$ 中极化子和双极化子的产生能随系统的总链长 N_T 的变化规律.可以看到,当 $N_T > 50$ 时,极化子和双极化子的产生能基本上不随系统的尺寸而变化,但在短链的时候 ($N < 50$) 极

化子和双极化子产生能则随链长的缩短而增加,说明短链不利于极化子和双极化子的产生.

混合卤化物中,两种单体通过一定的化学键相互连结,键合的强弱对混合物的性质有一定的影响. Hamiltonian 量中, β 的大小就反映了界面处化学键的强弱,图 4 给出极化子和双极化子的产生能随 β 的变化规律. 可以看到,当 β 由小到大改变时,双极化子的产生能始终低于两个带同种电荷的单极化子的产生能. 亦即当在混合卤化物中掺杂两个电荷时,形成的稳定的元激发始终是双极化子而不是两个单极化子,这一结论不依赖于界面的耦合强度. 图 4 表明在界面耦合强度较小时($\beta < 0.5$),元激发的产生能基本上不随其变化. 但当界面耦合大到一定强度时($\beta > 0.5$),元激发的产生能会有明显的变化:对负电元激发,界面耦合使得其产生能增大,而对于正电元激发,界面耦合则使其产生能减小. 说明界面耦合有利于正电元激发的产生.

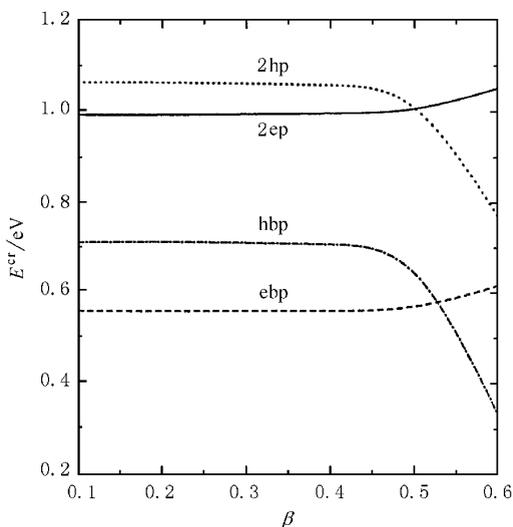


图 4 PtCl_{0.5}I_{0.5}中极化子和双极化子的产生能随 β 的变化

以前的研究发现,对于 PtCl 和 PtI 单链,都有 $E_{2p^+}^{cr} > E_{2p^-}^{cr} > E_{B^{2-}}^{cr} > E_{B^{2+}}^{cr}$ ^[1],由图 4 可以看到,与单链不同,在 PtCl_{0.5}I_{0.5}混合卤化物中,如果界面耦合较弱($\beta < 0.5$),则有 $E_{2p^+}^{cr} > E_{2p^-}^{cr} > E_{B^{2+}}^{cr} > E_{B^{2-}}^{cr}$;而当界面耦合较强($\beta > 0.5$)时, $E_{2p^-}^{cr} > E_{2p^+}^{cr} > E_{B^{2-}}^{cr} > E_{B^{2+}}^{cr}$.

双极化子是由两个同号电荷形成的束缚态,由于电子-晶格相互作用使得两个同号电荷之间存在吸引作用,从而束缚在一起形成双极化子.但是当考虑到电子-电子相互作用时,库仑作用却使得同号电

荷相互排斥.在这种情况下,双极化子的稳定性应取决于电子-晶格和电子-电子相互作用之间的竞争.

对于 PtCl 单链,如果不考虑电子-电子相互作用,已经发现双极化子的产生能要比两个单极化子的产生能低^[1],这样当掺杂两个电子时,在链中形成的元激发是双极化子.但如果由小到大增加链中的电子-电子相互作用,就会发现双极化子逐渐展宽,并在一定的电子-电子相互作用强度下,分离成两个单极化子.这就是电子-电子相互作用使得两个同号电荷相互排斥和分离而导致的.图 5 给出在电子-电子相互作用格点项 $U_{Pt} = 2U_{Cl} = (0, 1.0, 2.1)t_0$ 情况下, PtCl 掺杂两个负电荷时的位形,可以很清楚地看到上述变化过程.但对于混合卤化物,电子-电子相互作用对双极化子的影响和单链不同,计算发现,在 PtCl 单体的电子-电子相互作用逐步增强时,刚开始定域在该单体中的双极化子宽度加大;电子-电子相互作用继续增强,定域在 PtCl 中的负电荷会越过界面势垒,转移到 PtI 单体中,形成双极化子.图 6 给出 PtCl 单体中电子-电子相互作用格点项 $U_{Pt} = 2U_{Cl} = (0, 0.3, 0.5)t_0$ 等情况下, PtCl_{0.5}I_{0.5}中掺杂两个负电荷时的位形.

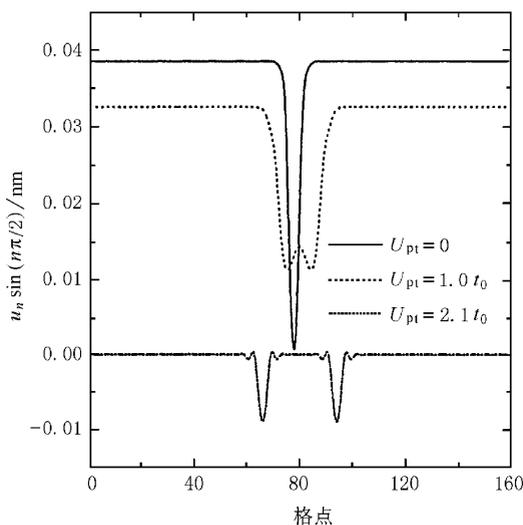


图 5 不同的电子-电子相互作用下, PtCl 掺杂两个负电荷时的位形. 其作用强度分别为 $U_{Pt} = 2U_{Cl} = 0, 1.0, 2.1 t_0$

由图 6 可以看到在混合卤化物中如果考虑到束缚双电荷的单体的电子-电子相互作用,那么双极化子并不会因为库仑排斥作用而分离形成两个单极化子,而是两个电荷都转移到了另一种材料中,仍然形成双极化子.如果同时考虑两种材料的电子-电子相

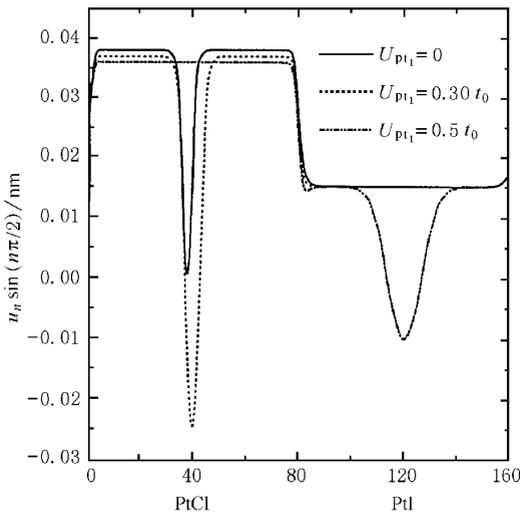


图6 不同的电子-电子相互作用下, $\text{PtCl}_{0.5}\text{I}_{0.5}$ 掺杂两个负电荷时的波形。只考虑 PtCl 单体中的电子-电子相互作用, 其作用强度分别为 $U_{\text{Pt}} = 2U_{\text{Cl}} = 0, 0.3t_0$ 和 $0.5t_0$ 。

相互作用, 掺杂电荷的局域位置则应该由系统能量的最低态来决定, 但计算发现两个电荷无论定域在哪种单体中, 始终束缚在一起形成定域的双极化子, 而不像金属卤化物单链那样发生分离。

上述结果说明, 和金属卤化物单链不同, 混合卤化物中电子-电子相互作用并不能使形成双极化子的两个同号电荷相互排斥而形成两个单极化子, 但两种单体的电子-电子相互作用的大小和它们的相对强度却对双极化子的局域位置有重要的影响。

混合卤化物一个很重要的特征是当两种金属卤化物单体满足一定条件时, 两种单体的能带会发生相互作用, 从而有电荷自发地从一种单体转移到另一种单体中。这种电荷转移十分类似于半导体中的 p-n 结, 在理论和实验上都有十分重要的研究价值^[22, 23]。

已知在混合卤化物中发生电荷的自发转移后, 会在一种单体中形成正电激发态, 同时在另一种单体中形成负电激发态。例如对于 $\text{PtBr}_{0.5}\text{I}_{0.5}$, 当 PtI 单体中电子-电子相互作用格点项 $U_{\text{Pt}} = U_{\text{I}} = 0$ 时, 计算发现有 3.66 个负电荷由 PtI 中转移到 PtBr 中, 在 PtBr 中形成负电元激发, 而在 PtI 中形成正电元激发。当对这样的系统进行电荷掺杂, 发现有很多不同于其他混合卤化物的特点, 图 7 给出这一系统在电荷掺杂时, 各单体中净电荷的分布。图 8 则给出这种材料在无掺杂、单电子和单空穴掺杂时的电荷分布。

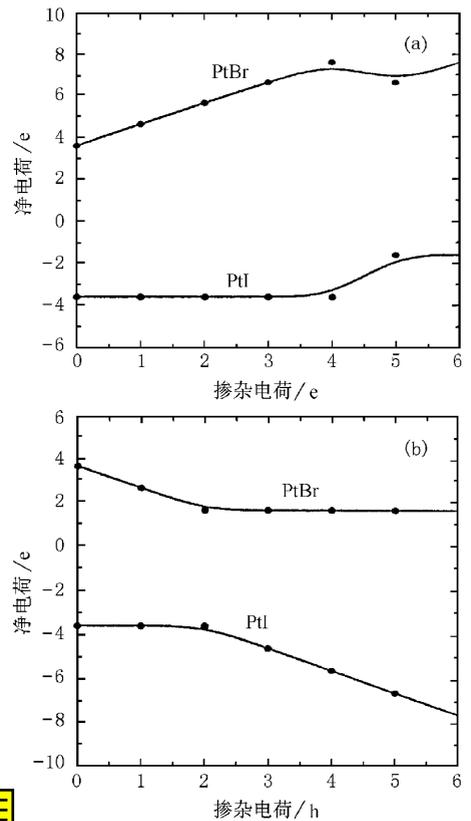


图7 掺杂电荷在发生电荷自发转移的材料 $\text{PtBr}_{0.5}\text{I}_{0.5}$ 中的分布 (a) 为电子掺杂 (b) 为空穴掺杂

上面的结果说明, 有电荷自发转移时, 混合卤化物单体对掺杂电荷没有像其他混合卤化物一样的选择性, 掺杂电荷的定域位置取决于两种单体对该电荷的束缚能力, 没有发现同单体在电荷转移中得失电荷的数量和类型之间有直接的关系。这一问题在对混合卤化物中电荷转移特性的实际应用时应该得到充分的重视。

4 结 论

对混合卤化物的掺杂研究发现, 双极化子的产生能要比两个单极化子的产生能小, 所以单电荷掺杂在混合卤化物中形成极化子, 而双电荷掺杂则形成稳定的双极化子; 单体的长度和界面耦合都会对极化子和双极化子的产生和稳定性有影响, 这些结论与金属卤化物单链相似。与金属卤化物单链不同的是, 混合卤化物中单体对掺杂电荷具有选择性, 混合卤化物中电子-电子相互作用并不能使形成双极化子的两个同号电荷相互排斥而形成两个单极化子, 但两种单体的电子-电子相互作用的大小和它们

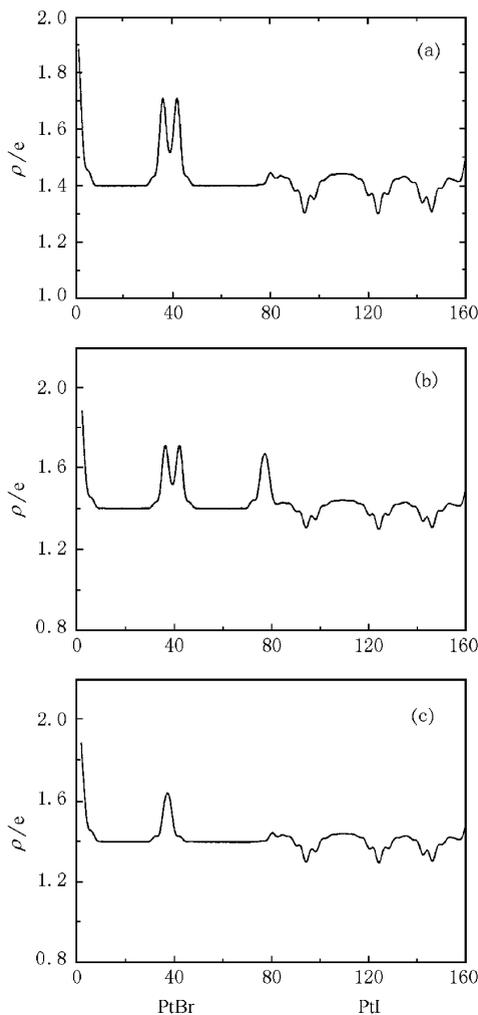


图8 发生电荷自发转移的材料 $\text{PtBr}_{0.5}\text{I}_{0.5}$ 的掺杂前后电荷分布的变化 (a)(b)和(c)分别为无掺杂、单电子和单空穴掺杂

的相对强度却对双极化子的局域位置有重要的影响;当金属卤化物中存在电荷自发转移时,混合卤化物单体对掺杂电荷没有像其他混合卤化物一样的选择性,掺杂电荷的定域位置取决于两种单体对该电

荷的束缚能力.

- [1] J. T. Gammel ,A. Saxena ,I. Batistic' ,A. R. Bishop ,S. R. Phillpot ,*Phys. Rev.* **B45**(1992) 6408.
- [2] S. M. Weber-Milbrodt ,J. T. Gammel ,A. R. Bishop ,E. Y. Loh Jr. ,*Phys. Rev.* **B45**(1992) 6435.
- [3] B. Scott *et al.* , *J. Mol. Struct.* **356**(1995) 207.
- [4] E. Matsushita ,*Phys. Rev.* **B51**(1995) 17332.
- [5] N. Kuroda ,M. Sakai ,Y. Nishina ,K. Sasaki ,*Phys. Rev. Lett.* , **68**(1992) 3056.
- [6] M. Alouani *et al.* ,*Phys. Rev. Lett.* ,**69**(1992) 3104 ;**71**(1993) 1415.
- [7] G. S. Kanner *et al.* ,*Phys. Rev.* **B50**(1994) 18682.
- [8] X. Sun ,Z. G. Yu ,K. H. Lee ,T. Y. Park ,D. L. Lin ,*Synth. Metals* **70**(1995) 1199.
- [9] Z. G. Yu ,X. Sun ,J. H. Zhu ,X. C. Shen ,*Phys. Rev.* ,**B50**(1994) 18633.
- [10] Z. G. Yu ,K. H. Lee ,T. Y. Park ,Y. Takahashi ,X. Sun ,*J. Phys.* **C6**(1994) 6773.
- [11] M. Alouani ,R. C. Albers ,*Synth. Metals* **55-57**(1993) 3352.
- [12] H. Okamoto *et al.* ,*Phys. Rev.* **B54**(1996- II) 8438.
- [13] R. J. Donohoe *et al.* ,*Phys. Rev.* **B45**(1992) 13185.
- [14] N. Kuroda ,M. Nishida ,N. Matsushita ,M. Yamashita ,*Synth. Metals* **71**(1995) 1921.
- [15] X. Z. Huang *et al.* ,*Synth. Metals* **55-57**(1993) 3443.
- [16] A. Saxena *et al.* ,*Synth. Metals* **71**(1995) 1659.
- [17] Z. Shui *et al.* ,*Solid State Commun.* **97**(1996) 1063.
- [18] Y. Wada ,T. Furuta ,M. Yamashita ,K. Toriumi ,*Synth. Metals* , **70**(1995) 1195.
- [19] S. C. Hockett ,E. Garcia ,J. R. Laia ,D. Carroll ,B. I. Swanson ,*Synth. Metals* **A1-43**(1991) 2777.
- [20] S. C. Hockett ,C. A. Arrington ,C. J. Burns ,D. L. Clark ,B. I. Swanson ,*Synth. Metals* **A1-43**(1991) 2769.
- [21] A. Bulou ,R. J. Donohoe ,B. I. Swanson ,*J. Phys.* ,**C3**(1991) 1709.
- [22] X. Z. Huang ,A. Saxena ,A. R. Bishop ,B. L. Scott ,B. I. Swanson ,*Synth. Metals* **55-57**(1993) 3449.
- [23] J. H. Wei ,S. J. Xie ,L. M. Mei ,*Phys. Lett.* ,**A252**(1999) 49.

POLARONS AND BIPOLARONS IN MIXED HALIDE MX COMPOUNDS*

WEI JIAN-HUA XIE SHI-JIE MEI LIANG-MO

(*Department of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China*)

(Received 14 March 2000; revised manuscript received 18 May 2000)

ABSTRACT

Polarons and bipolarons in mixed halide MX compounds were studied in the frame work of the two-band extended Peierls-Hubbard model. Different from the isolated MX chains, it was found that the segments tend to select impurities in mixed halide compounds. Then the charge confinement and the effect of electron-electron interactions were investigated. Finally the properties of impurities in mixed halide compounds with spontaneous charge transfer were also discussed.

Keywords : mixed halide compounds, polarons, charge confinement

PACC : 7145, 7138, 7130

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 59871024).