

Замечание. Используя теорию двойственности Е. Гольштейна в банаховых пространствах [3-4] можно, по-видимому, полученные результаты распространить на задачи типа (7) — (8) с ограничениями на x_i и u_i (ср. [5]).

ЛИТЕРАТУРА

1. Люстерник Л. Л., Соболев В. И., Элементы функционального анализа, М., 1965.
2. Трикоми Ф., Интегральные уравнения, М., 1960.
3. Гольштейн Е. Г., ДАН, 172, № 5 (1967).
4. Гольштейн Е. Г., Эконом. и матем. методы, IV, вып. 4, 597 (1968).
5. Ульм С., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., 18, 3 (1969).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
6/X 1969

EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 19. KÕIDE
FÜSIKA * MATEMAATIKA. 1970, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 19
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1970, № 2

<https://doi.org/10.3176/phys.math.1970.2.18>

В. ХИЖНЯКОВ

К ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ЯНА—ТЕЛЛЕРА

V. HIZNJAKOV. DÜNAAMILISE JAHN-TELLERI EFEKTI TEORIIAST

V. HIZHNYAKOV. ON THE THEORY OF DYNAMICAL JAHN-TELLER EFFECT

Для разрешенных переходов в центрах люминесценции высокой симметрии возбужденные электронные состояния являются вырожденными. В таких состояниях электронная энергия зависит от координат неполносимметричных колебаний, вследствие чего не только понижается точечная симметрия центра — статический эффект Яна—Теллера (СЯТ), но и возникает существенная перестройка энергетического спектра — динамический эффект Яна—Теллера (ДЯТ).

В работе [1] был предложен полуклассический вариант теории спектров поглощения примесных центров для вырожденных состояний и было показано, что ДЯТ приводит к расщеплению максимума полос поглощения (см. также [2, 3]). Квантовая теория таких спектров развита лишь для случая слабого электрон-фононного взаимодействия [4].

В работах [5, 6] была сделана попытка построить квантовую теорию электронно-колебательных спектров для вырожденных состояний при произвольной силе электрон-фононного взаимодействия. Однако авторы [5, 6] не учли ДЯТ. Действительно, в линейном, по колебательным координатам q_{κ} , приближении матрица взаимодействия $\{ \langle p | A | p' \rangle \} = \sum_{\kappa} \{ \langle p | A_{\kappa} | p' \rangle \} q_{\kappa}$ ($p = 1, 2, \dots, n$). ДЯТ связан с учетом таких колебаний $\kappa_1, \kappa_2, \dots$, для которых матрицы $\{ \langle p | A_{\kappa_i} | p' \rangle \}$ не коммутируют. Но в [5, 6] молчаливо предполагается, что эти матрицы коммутируют.

В данной работе предлагается квантовая теория поглощения для переходов между невырожденным (A_{1g}) и трехкратно вырожденным (F_{1u}) электронными состояниями при произвольной силе электрон-фононного взаимодействия. Учитывается взаимодействие с A_{1g} и F_{2g} колебаниями (с последними связан ДЯТ, см. [1]), однако взаимодействие с E_g колебаниями, приводящими к СЯТ, считается несущественным.

Если пренебречь неадиабатическими переходами между электронными состояниями разной энергии, то Фурье-образ $I(t)$ спектра поглощения электронного перехода между невырожденным и трехкратно вырожденным состояниями электронного перехода можно представить в виде $I(t) = J(t) \sum_{\alpha} |\langle \alpha | d | 0 \rangle|^2$, где α нумерует вырожденные электронные состояния, собственные функции которых $|\alpha\rangle$ считаются независимыми от колебательных координат, $\langle \alpha | d | 0 \rangle$ — электронный матричный элемент между основным ($|0\rangle$) и одним из возбужденных состояний, $J(t) = (\hat{J}(t))_{\alpha\alpha}$ — диагональный элемент матрицы Фурье-образа $\hat{J}(t)$:

$$\hat{J}(t) = \langle e^{\frac{it}{\hbar} H} e^{-\frac{it}{\hbar} H_0} \rangle. \quad (1)$$

Здесь H — матрица с элементами $\langle \alpha | \hat{H} | \alpha' \rangle$, где \hat{H} — полный гамильтониан кристалла с примесью; $H_0 = H_L \cdot I$, где $H_L = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle$ — колебательный гамильтониан в основном электронном состоянии (далее он считается гармоническим); I — единичная матрица; $\langle \dots \rangle \equiv \sum_f \exp(-E_f/kT) \langle f | \dots | f \rangle [\sum_f \exp(-E_f/kT)]^{-1}$ — знак статистического усреднения, где E_f и $|f\rangle$ — собственные значения и собственные функции H_L .

Легко убедиться, что $\hat{J}(t) = J(t) \cdot I$.

Выберем электронные состояния $|\alpha\rangle$ рассматриваемого представления F_{1u} преобразующимися как x , y и z компоненты полярного вектора. Тогда, если пренебречь взаимодействием с E_g -колебаниями, матрица $H_{eL} = H - H_0$ в линейном, по смещениям ядер, приближении будет равна:

$$H_{eL} = (E_0 + aq_0) \cdot I + c \sum_{i=1}^3 \tau_i q_i, \quad (2)$$

где E_0 — энергия возбужденного электронного состояния, q_i — ($i=0, 1, 2, 3$) — симметризованные смещения представлений A_{1g} (при $i=0$) и F_{2g} (при $i=1, 2, 3$), a и c — параметры теории,

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Симметризованные смещения q_i можно разложить по нормальным колебаниям кристалла x_j : $q_i = \sum_j e_{ij} x_j$, где $\sum_j e_{ij} e_{i'j} = \delta_{ii'}$, $|e_{ij}|^2 = |e_{j'j}|^2$, $i=1, 2, 3$. Так как x_j преобразуются по представлениям точечной группы кристалла с дефектом, то

$$e_{ij} e_{i'j} = \delta_{ii'} |e_{ij}|^2. \quad (4)$$

Подставим (2) в (1) и учтем (4). Мы получим $\hat{J}(t) = J_0(t) \hat{J}_1(t)$, где $J_0(t) = \langle \exp \left\{ \frac{it}{\hbar} (H_0 + aq_0) \right\} \exp \left\{ -\frac{it}{\hbar} H_0 \right\} \rangle = \exp \{g_0(t)\}$ — Фурье-образ Лэкса для полностью симметричных колебаний ($g_0(t) = (a^2/2\hbar) \sum_j |e_{0j}|^2 \omega_j^{-3} \times [(e^{i\omega_j t} - 1)(\bar{n}_j + 1) + (e^{-i\omega_j t} - 1)\bar{n}_j - i\omega_j t]$);

$$\hat{J}_1(t) = \langle e^{\frac{it}{\hbar} (H_0 + c \sum_{i=1}^3 \tau_i q_i)} e^{-\frac{it}{\hbar} H_0} \rangle \quad (5)$$

— матрица Фурье-образа для F_{2g} -колебаний. Формулу (5) можно переписать в виде

$$\hat{J}_1(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (ic/\hbar)^{2n} \sum_{i_1=1}^3 \dots \sum_{i_{2n}=1}^3 \tau_{i_1} \dots \tau_{i_{2n}} \int_0^t ds_1 \dots \int_0^t ds_{2n} \times \quad (6)$$

$$\times \langle T_{-} q_{i_1}(s_1) \dots q_{i_{2n}}(s_{2n}) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \hat{C}_n g^n(t),$$

где T_{-} — знак отрицательного хронологического упорядочения при $t > 0$, $g(t) = (c^2/2\hbar) \sum_j |e_j|^2 \omega_j^{-3} [(e^{i\omega_j t} - 1)(n_j + 1) + (e^{-i\omega_j t} - 1)\bar{n}_j - i\omega_j t]$,

\hat{C}_n — матрица, получаемая из $\sum_{i_1=1}^3 \dots \sum_{i_{2n}=1}^3 \tau_{i_1} \dots \tau_{i_{2n}}$ путем сложения матриц со всевозможным образом спаренными индексами i_k ($k = 0, 1, \dots, 2n$). Например, $\hat{C}_1 = 2I$, $\hat{C}_2 = 10I$, $\hat{C}_3 = 74I$, ...

Нетрудно заметить, что $\hat{S}(z) = \pi^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 \exp(-x^2 I + \sqrt{2}z \sum_{i=1}^3 \tau_i x_i)$, где $x^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ есть производящая функция для $\hat{C}_n/(2n)!$, а $\hat{S}(\sqrt{2}g(t)) = \hat{J}_1(t)$. Так как $J_1(t) \sim I$, то $\hat{J}_1(t) = \frac{1}{3} \text{Sp} \hat{S}(\sqrt{2}g(t))$. Переходя в последней формуле к представлению, в котором матрица $\sum_{i=1}^3 \tau_i x_i$ диагональна, и используя сферические координаты, получим:

$$J_1(t) = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \int d\Omega \int_0^{\infty} dx x^2 e^{-x^2 + 2xy_i(\lambda)} \overline{V(g)t} = \quad (7)$$

$$= \frac{1}{12\pi} \sum_{i=1}^3 \int_{-2/3\sqrt{3}}^{2/3\sqrt{3}} d\lambda f(\lambda) (1 + 2y_i^2(\lambda)g(t)) e^{y_i^2(\lambda)g(t)},$$

где $\lambda = 2x_1 x_2 x_3 x^{-3}$, $y_i(\lambda)$ — собственные значения матрицы $\sum_{i=1}^3 \tau_i x_i$, являющиеся корнями уравнения $y^3 - y - \lambda = 0$, $f(\lambda) = f(-\lambda) = \frac{d\Omega}{d\lambda}$, $f(|\lambda|) = 8[y_3^2(y_1^2 - y_2^2)]^{-1/2}$, $K(\sqrt{y_1^2(y_3^2 - y_2^2)/y_3^2(y_1^2 - y_2^2)})$, $y_i \equiv y_i(|\lambda|)$, $y_1 > y_2 \geq y_3$, $K(x) \equiv F\left(\frac{\pi}{2}, x\right)$ — полный эллиптический интеграл первого рода.

В случае сильного электрон-фононного взаимодействия $g(t) \approx \approx -\frac{1}{2} \sigma^2 t^2$, где $\sigma^2 = (c^2/\hbar) \sum_j |e_j|^2 \omega_j^{-4} (2\bar{n}_j + 1)$. При этом обратное Фурье-преобразование $J_1(t)$ сводится к формуле (2, 12) работы [1], если в последней заменить $c^2 kT$ на $2\sigma^2$. Таким образом, при сильном электрон-фононном взаимодействии в рассмотренном случае квантовая теория дает ту же форму спектра поглощения, что и полуклассическая теория, но значение параметров изменяется.

Автор признателен В. Лооритсу за ценные замечания, а также Г. Завту и Н. Кристофелю за обсуждение результатов работы.

Примечание при корректуре: знак T -упорядочения в формуле (6) должен относиться и к матрицам t_i . Это ограничивает справедливость формулы (7) случаем сильного электрон-фононного взаимодействия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Toyozawa J., Inoue M., J. Phys. Soc. Japan, **21**, 1963 (1966).
2. Кристофель Н. Н., Опт. и спектр., **22**, 74 (1967).
3. Кристофель Н. Н., Завт Г. С., ФТТ, **5**, 1279 (1963).
4. Mc Cumber D. E., J. Math. Phys., **5**, 508 (1964).
5. Перлин Ю. Е., ФТТ, **7**, 1941 (1968).
6. Розенфельд Ю. Б., Вехтер Б. Г., Цукерблат Б. С., ЖЭТФ, **55**, 2252 (1968).

Институт физики и астрономии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
21/X 1969
В окончательном виде
11/XI 1969

EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 19. KOIDE
FÜSIKA * MATEMAATIKA. 1970. NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 19
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1970, № 2

В. ХИЖНЯКОВ, Э. РЕАЛО

КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОННЫХ ПРОЦЕССОВ И ЭФФЕКТ МЁССБАУЭРА

V. HIZNYAKOV, E. REALO. ELEKTRONPROTSESSIDE KINEETIKA JA MÖSSBAUERI EFEKT
V. HIZHNYAKOV, E. REALO. KINETICS OF ELECTRON PROCESSES AND THE MÖSSBAUER
EFFECT

Целью данной работы является указать на одну возможность исследования кинетики электронных процессов в изоляторах и полупроводниках с помощью эффекта Мёссбауэра. Предлагаемый метод состоит в исследовании влияния, которое оказывает облучение видимым или инфракрасным светом на мёссбауэровский спектр кристалла, являющегося одновременно источником γ -квантов.

Суть метода в следующем. Радиоактивный распад материнских ядер источника γ -квантов обычно приводит к тому, что в первый момент после распада суммарный заряд мёссбауэровского ядра и его электронной оболочки возрастает (см., например, [1]). Процессами, приводящими к такому изменению заряда, могут быть β -распад, электронная конверсия и электронный захват с последующей Оже-ионизацией электронной оболочки. Указанные процессы в ядре и в электронной оболочке совершаются весьма быстро (за время $\sim 10^{-13}$ сек) по сравнению со временем жизни мёссбауэровского уровня τ_0 .

Время τ_0 обычно настолько велико, что в металлах и при обычных условиях в полупроводниках и изоляторах ионизованная электронная оболочка мёссбауэровского ядра источника успевает получить недостающие электроны из кристалла еще до испускания мёссбауэровского γ -кванта. В результате указанная ионизация электронной оболочки на опыте не обнаруживается.