

Инна РЕБАНЕ, В. ХИЖНЯКОВ

ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ РЕЗОНАНСНОГО И НЕРЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В ПРИМЕСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

(Представил К. К. Ребане)

1. Введение

Развитая в работах [1] (см. также обзоры [2]) теория резонансного вторичного свечения (РВС) примесных центров кристаллов учитывала вклад в оператор поляризуемости только резонансного электронного уровня (одного или нескольких). Цель настоящей работы — рассмотреть картину вторичного свечения (ВС), учитывая наряду с резонансным электронным уровнем и все остальные (нерезонансные). Отметим, что в ряде случаев учет последних весьма существен, поскольку возникающая интерференция вкладов от резонансного и нерезонансных уровней в сечении рассеяния влияет на форму возбуждающих профилей рэлеевской и комбинационных линий.

2. Учет резонансной и нерезонансной поляризуемостей

Рассмотрим прежде всего интерференцию резонансного и нерезонансного рассеяния света в общем виде. Как известно, сечение рассеяния света в телесный угол $d\theta$ в спектральный интервал $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ определяется формулой

$$I(\omega_0, \Omega) d\Omega d\theta = \sum_{\alpha\alpha'} i_{\alpha} i_{\alpha'} n_{\beta} n_{\beta'} W_{\alpha\beta\beta'\alpha'}(\omega_0, \Omega) d\theta d\Omega, \quad (1)$$

где ω_0 — частота первичного (возбуждающего) фотона, i_{α} и n_{β} — декартовы компоненты единичных векторов поляризации первичного и вторичного фотонов. Тензор четвертого ранга

$$W_{\alpha\beta\beta'\alpha'}(\omega_0, \Omega) = B \sum_i w_i \sum_f (P_{\alpha\beta})_{if} (P_{\beta'\alpha'})_{fi} \delta(\omega_0 - \Omega + E_i - E_f) \quad (2)$$

есть тензор ВС. Здесь $B = 4\pi^2 \Omega^3 \omega_0 / c^4$ и i, f — номера начального ($|i\rangle$) и конечного ($|f\rangle$) состояний вещества, $E_i(E_f)$ — их энергии, w_i — вероятность нахождения вещества в начальном состоянии, тензор

$$(P_{\alpha\beta})_{if} = \sum_m \left(\frac{\langle i | d_{\alpha} | m \rangle \langle m | d_{\beta} | f \rangle}{E_m - E_i - \omega_0 + i\gamma_m} + \frac{\langle i | d_{\beta} | m \rangle \langle m | d_{\alpha} | f \rangle}{E_m - E_f + \omega_0} \right) \quad (3)$$

называется тензором рассеяния или поляризуемостью перехода $i \rightarrow f$,

γ_m — константа радиационного затухания промежуточного состояния $|m\rangle$, \vec{d} — оператор дипольного момента оптических электронов.

Электронно-колебательные состояния вещества будем описывать в адиабатическом приближении. В качестве исходных и конечных состояний в (3) выберем колебательные состояния $|v_0\rangle$ и $|v'_0\rangle$ основного электронного состояния $|0\rangle$: $|i\rangle = |v_0\rangle|0\rangle$, $|f\rangle = |v'_0\rangle|0\rangle$; а промежуточные состояния запишем в виде $|m\rangle = |v_e\rangle|e\rangle$. Тогда

$$(P_{\alpha\beta})_{if} = (P_{\alpha\beta,n})_{if} + (P_{\alpha\beta,r})_{if}, \quad (4)$$

где

$$(P_{\alpha\beta,n})_{if} = \sum_e \sum_{v_e} \left(\frac{\langle v_0 | M_{\alpha}^{e+} | v_e \rangle \langle v_e | M_{\beta}^e | v'_0 \rangle}{E_m - E_i - \omega_0} + \frac{\langle v_0 | M_{\beta}^{e+} | v_e \rangle \langle v_e | M_{\alpha}^e | v'_0 \rangle}{E_m - E_f + \omega_0} \right) \quad (5)$$

и

$$(P_{\alpha\beta,r})_{if} = \sum_{v_r} \frac{\langle v_0 | M_{\alpha}^{r+} | v_r \rangle \langle v_r | M_{\beta}^r | v'_0 \rangle}{E_r - E_i - \omega_0 + i\gamma_r} \quad (6)$$

— нерезонансный и резонансный тензоры поляризуемости соответственно. Здесь $M_{\alpha}^e = \langle e | d_{\alpha} | 0 \rangle$ — электронный матричный элемент перехода $|0\rangle \rightarrow |e\rangle$. В (5) штрих у суммы по e означает, что не учтен уровень $|e\rangle = |r\rangle$; в (6) сохранен только первый член из правой части формулы (3), а второй член, описывающий процессы с двумя фотонами в промежуточном состоянии поля, опущен ввиду его малости в резонансном случае по сравнению с первым.

Используя интегральное представление δ -функции, формулу (2) для тензора ВС можно записать в виде

$$W_{\alpha\beta\beta'\alpha'}(\omega_0, \Omega) = B/(2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} d\mu e^{-i(\omega_0 - \Omega)\mu} \langle P_{\alpha\beta}(\theta) P_{\beta'\alpha'}^+(\mu) \rangle_0, \quad (7)$$

где $\langle \dots \rangle = \sum_{v_0} \omega_{v_0} \langle v_0 | \dots | v_0 \rangle = \text{Sp}(e^{-H_0/kT} \dots) / \text{Sp}(e^{-H_0/kT})$ — знак статистического усреднения по исходным колебательным состояниям; $P_{\alpha\beta}(\mu) = \exp(i\mu H_0) P_{\alpha\beta} \exp(-i\mu H_0)$; H_0 — колебательный гамильтониан исходного электронного состояния: $H_0 |v_0\rangle = E_{v_0} |v_0\rangle$; $P_{\alpha\beta}$ — оператор поляризуемости с матричными элементами $\langle v_0 | P_{\alpha\beta} | v'_0 \rangle = (P_{\alpha\beta})_{v_0 v'_0} = (P_{\alpha\beta})_{if}$.

Ниже для резонансного оператора поляризуемости основное $|0\rangle$ и возбужденное $|r\rangle$ электронные состояния принимаются невырожденными, используется приближение Кондона: $M_{\alpha}^r, M_{\beta}^r = \text{const}$, $\gamma_r = \gamma = \text{const}$ и предполагается, что колебательные гамильтонианы H_0 и H_r отличаются лишь положением равновесия ядер. В этом случае резонансный оператор поляризуемости имеет следующий вид:

$$P_{\alpha\beta,r} = -i M_{\alpha}^{r+} M_{\beta}^r \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega_i - \omega_0)\tau - \gamma_r T} e^{\nabla(-\tau) \cdot \nabla}. \quad (8)$$

Здесь

$$\nabla(x) = \sum_j \xi_{0j} (a_j e^{-i\omega_j x} - a_j^{\dagger} e^{i\omega_j x}), \quad (9)$$

ξ_{0j}^2 — безразмерные stokсовы потери, приходящиеся на осциллятор j ;

a_j^+ и a_j — операторы рождения и уничтожения фонона частоты ω_j ; ω_1 — частота чисто электронного перехода; T — символ упорядочения операторов в момент времени t слева от операторов в момент времени ноль. Как видно, в случае невырожденных основного и возбужденного (резонансного) электронных состояний оператор поляризуемости четный: $P_{\alpha\beta,r} = P_{\beta\alpha,r}$.

Для нерезонансного оператора поляризуемости предположим, как обычно, что разности энергий электронных переходов и ω_0 много больше колебательной энергии:

$$E_m - E_i - \omega_0 = (E_e + E_{v_e}) - (E_0 + E_{v_0}) - \omega_0 \simeq -\omega_{0e} - \omega_0,$$

$$E_m - E_f + \omega_0 = (E_e + E_{v_e}) - (E_0 + E_{v_0}) + \omega_0 \simeq -\omega_{0e} + \omega_0$$

$$(\omega_{0e} \equiv E_0 - E_e).$$

Тогда

$$P_{\alpha\beta,n} \simeq - \sum_e' \left(\frac{\sum_{v_e} M_{\alpha}^{e+} |v_e\rangle \langle v_e| M_{\beta}^e}{\omega_{0e} + \omega_0} + \frac{\sum_{v_e} M_{\beta}^{e+} |v_e\rangle \langle v_e| M_{\alpha}^e}{\omega_{0e} - \omega_0} \right). \quad (10)$$

Предполагая, далее, что электронные матричные элементы $M_{\alpha}^e, M_{\beta}^e$ зависят только от колебательных координат основного электронного состояния (т. е. не зависят от координат промежуточных состояний), запишем нерезонансный оператор поляризуемости в виде

$$P_{\alpha\beta,n} = - \sum_e' \frac{2\omega_{0e} M_{\alpha}^{e+} M_{\beta}^e}{\omega_{0e}^2 - \omega_0^2}. \quad (11)$$

Хотя, вообще говоря, тензор $P_{\alpha\beta,n}$ несимметричен [3], однако в приближении (11) он, как и тензор $P_{\alpha\beta,r}$, симметричен.

Разложим $P_{\alpha\beta,n}$ в ряд по безразмерным нормальным координатам $\xi_j(x) = a_j e^{-i\omega_j x} + a_j^+ e^{i\omega_j x}$:

$$P_{\alpha\beta,n} = P_{\alpha\beta,n,0} + \sum_{k=1}^{\infty} (1/k!) P_{\alpha\beta,n,i_1 \dots i_k} \left(\prod_{r=1}^k \xi_{i_r} \right). \quad (12)$$

В разложении (12) члены k -го порядка по ξ соответствуют комбинационному рассеянию k -го порядка. Ниже мы ограничимся рассмотрением рэлеевского и комбинационного рассеяния первого порядка. В таком случае

$$P_{\alpha\beta,n} \simeq P_{\alpha\beta,n,0} + \sum_i P_{\alpha\beta,n,i} \xi_i, \quad (13)$$

где

$$P_{\alpha\beta,n,0} = - \sum_e' \frac{2\omega_{0e}}{\omega_{0e}^2 - \omega_0^2} (M_{\alpha}^{e+} M_{\beta}^e)_0, \quad (14)$$

$$P_{\alpha\beta,n,i} = - \sum_e' \frac{2\omega_{0e}}{\omega_{0e}^2 - \omega_0^2} \left(\frac{\partial (M_{\alpha}^{e+} M_{\beta}^e)}{\partial \xi_i} \right)_{\{\xi_i\}=0}. \quad (15)$$

Следует подчеркнуть, что последовательная теория рэлеевского и ком-

бинационного рассеяния должна учитывать не только поляризуемость примесного центра, но и поляризуемость кристалла-основания. Поэтому в формуле (12) под $P_{\alpha\beta,n}$ следует понимать нерезонансную часть поляризуемости всего кристалла, включая центр.

3. Сечение рассеяния. Возбуждающие профили

Для получения тензора ВС (7) необходимо вычислить коррелятор

$$\begin{aligned} \langle P_{\alpha\beta} P_{\beta'\alpha'}^+(\mu) \rangle_0 = & \langle P_{\alpha\beta,r} P_{\beta'\alpha',r}^+(\mu) \rangle_0 + \langle P_{\alpha\beta,r} P_{\beta'\alpha',n}^+(\mu) \rangle_0 + \\ & + \langle P_{\alpha\beta,n} P_{\beta'\alpha',r}^+(\mu) \rangle_0 + \langle P_{\alpha\beta,n} P_{\beta'\alpha',n}^+(\mu) \rangle_0. \end{aligned} \quad (16)$$

Подставляя (16) в (7), получаем, что первый член в правой части формулы (16) описывает РВС, последний — нерезонансное ВС (НВС), а два средних учитывают интерференцию РВС и НВС. Используя разложение операторов $P_{\alpha\beta,r}$ и $P_{\alpha\beta,n}$ по a_j и a_j^+ , можно сечение всего ВС представить в виде разложения по порядку (s) рассеяния

$$I(\omega_0, \Omega) = \sum_s I_s(\omega_0, \Omega) = \sum_s [I_{r,s}(\omega_0, \Omega) + I_{i,s}(\omega_0, \Omega) + I_{n,s}(\omega_0, \Omega)]. \quad (17)$$

Следует отметить, что фигурирующие в (17) парциальные спектры РВС описывают все компоненты ВС: резонансное рэлеевское и резонансное комбинационное рассеяние (РКР), а также горячую и обычную люминесценцию [2], а парциальные спектры НВС — лишь рэлеевское и нерезонансное комбинационное рассеяние (НКР). Член нулевого порядка в (17), описывающий рэлеевское рассеяние, равен

$$I_0(\omega_0, \Omega) = B \left| |Mr|^2 \Phi(\omega_0) + P_{n,0} \right|^2 \delta(\omega_0 - \Omega), \quad (18)$$

$$|Mr|^2 \equiv \sum_{\alpha,\beta} i_{\alpha} n_{\beta} M_{\alpha}^{r+} M_{\beta}^r = \sum_{\alpha',\beta'} i_{\alpha'} n_{\beta'} M_{\beta'}^{r+} M_{\alpha'}^r, \quad (19)$$

$$P_{n,0} \equiv \sum_{\alpha,\beta} i_{\alpha} n_{\beta} P_{\alpha\beta,n,0} = \sum_{\alpha',\beta'} i_{\alpha'} n_{\beta'} P_{\beta'\alpha',n,0}, \quad (20)$$

$$\Phi(\omega) = -i \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega_0 - \omega)\tau - \gamma\tau + g(\tau)}. \quad (21)$$

Функция

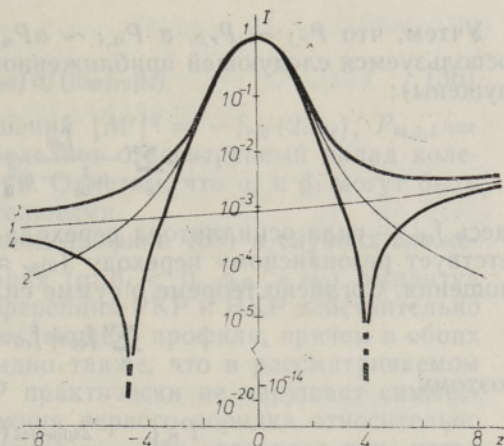
$$g(x) = \langle \nabla^2 \rangle_0 - \langle \nabla \nabla(x) \rangle_0 \quad (22)$$

определяет логарифм Фурье-образа спектров поглощения и люминесценции [4]. В гармоническом приближении эта функция равна

$$g(x) = \sum_j \xi_{0j}^2 [(e^{i\omega_j x} - 1)(\bar{n}_j + 1) + (e^{-i\omega_j x} - 1)\bar{n}_j], \quad (23)$$

где $\bar{n}_j = [\exp(\omega_j/kT) - 1]^{-1}$ — среднее число фононов частоты ω_j при температуре T .

Как видно из формулы (18), в случае парциального спектра нулевого порядка происходит сложение амплитуд вероятностей резонансного и нерезонансного рассеяния, что приводит к эффекту интерференции последних. Парциальный спектр первого порядка



Возбуждающие профили: нерезонансного рассеяния (1), резонансного рассеяния (2), с учетом интерференции резонансного и нерезонансного рассеяния в случае суммы (3) и разности (4) амплитуд. Параметры: $\sigma = 0,02\omega_0$, $\omega_0 = 1,5\omega_0$, $f_{r0} = 0,1$ и $\alpha_i/\beta_i = 0,1$ (3) или $\alpha_i/\beta_i = -0,1$ (4).

$$I_1(\omega_0, \Omega) = B \sum_i \{ (\bar{n}_i + 1) \delta(\Omega - \omega_0 + \omega_i) \left| |M^r|^2 \xi_{0i} [\Phi(\omega_0) - \right. \quad (24)$$

$$\left. - \Phi(\Omega) \right] - P_{n,i} \right|^2 + \bar{n}_i \delta(\Omega - \omega_0 - \omega_i) \left| |M^r|^2 \xi_{0i} [\Phi(\omega_0) - \Phi(\Omega)] + P_{n,i} \right|^2 \},$$

где

$$P_{n,i} \equiv \sum_{\alpha, \beta} i_{\alpha} n_{\beta} P_{\alpha\beta, n, i} = \sum_{\alpha', \beta'} i_{\alpha'} n_{\beta'} P_{\beta' \alpha', n, i}. \quad (25)$$

Для анализа возбуждающего профиля используем разложение $\Phi(\Omega) \simeq \Phi(\omega_0) \mp \omega_i \Phi'(\omega_0)$, где знак «минус» соответствует стоксовой части спектра, знак «плюс» — антистоксовой. Тогда

$$I_1(\omega_0, \Omega) = B \sum_i \{ [(\bar{n}_i + 1) \delta(\Omega - \omega_0 + \omega_i) + \quad (26)$$

$$+ \bar{n}_i \delta(\Omega - \omega_0 - \omega_i)] \left| |M^r|^2 \xi_{0i} \omega_i \Phi'(\omega_0) - P_{n,i} \right|^2 \}.$$

Здесь возможны два случая (см. рисунок): действительная часть амплитуды резонансного рассеяния и амплитуда нерезонансного рассеяния (которая целиком действительна) имеют либо одинаковые знаки (3), либо разные (4). Из рисунка видно, что в этих случаях возбуждающие профили существенно различаются. Знаки амплитуд зависят от вида функции $\Phi(\omega)$, знака сдвига положения равновесия ξ_{0i} , знака производной $[\partial(M_{\alpha}^{e+} M_{\beta}^e)/\partial \xi_i]_{\xi_i=0}$ и знака разности $\omega_{0e}^2 - \omega_0^2$. Сложение или вычитание амплитуд происходит для каждого нормального колебания в отдельности. При этом эффект интерференции рассеяний возможен лишь на тех колебаниях, которые дают вклад как в резонансное рассеяние, так и в нерезонансное. В рассматриваемом случае резонансного перехода между невырожденными уровнями вклад в РВС дают только полносимметричные колебания. Поэтому и интерференция имеет место только для рассеяния на полносимметричных колебаниях.

4. Оценки. Заключительные замечания

Сравним вклады резонансного и нерезонансных уровней в сечение рассеяния первого порядка на колебаниях примесного центра. В этом случае вклад в рассеяние будет давать только та часть поляризуемости, которая связана с центрами.

Учтем, что $P_{r,1} \sim P_{r,0}$, а $P_{n,i} \sim \alpha P_{n,0}$, где обычно $\alpha \sim 0,1 - 0,01$, и воспользуемся следующей приближенной формулой (тензорные индексы опущены):

$$P_1 \sim \alpha \sum_e' \frac{f_{e0}}{\omega_{0e}^2 - \omega_0^2} + \frac{f_{r0}}{2\omega_{0r}\sigma}. \quad (27)$$

Здесь f_{e0} — сила осциллятора перехода между уровнями 0 и e , f_{r0} соответствует резонансному переходу ($\omega_{0r} \approx \omega_0$), σ — ширина спектра поглощения. Согласно теореме о сумме сил осцилляторов,

$$\sum_e' f_{e0} + f_{r0} = 1. \quad (28)$$

Поэтому

$$\frac{P_{n,1}}{P_{r,1}} \sim \frac{2\omega_{0r}\sigma\alpha(1-f_{r0})}{f_{r0}(\bar{\omega}_{0e}^2 - \omega_{0r}^2)}, \quad (29)$$

где $\bar{\omega}_{0e}$ — среднее значение частот электронных переходов ω_{0e} . Например, при $\sigma = 0,02 \omega_{0r}$, $\omega_{0e} = 1,5 \omega_{0r}$ и $f_{r0} = 0,1$ величина $P_{n,1}/P_{r,1} \sim 0,03$.

Вклад НВС в высшие порядки парциальных спектров обычно очень мал и им можно пренебречь.

Для получения возбуждающего профиля рассеяния первого порядка воспользуемся формулой

$$\Phi(\omega) = P \int dx \chi(x) / (\omega - x) - i\pi\chi(\omega), \quad (30)$$

где $\chi(\omega_0)$ — спектр поглощения. Зададим его в виде нормального распределения

$$\chi(\omega_0) = e^{-z^2} / (\sqrt{2\pi}\sigma), \quad (31)$$

где

$$z = (\omega_0 - \omega_{0r}) / (\sqrt{2}\sigma) \quad (32)$$

— безразмерная частота возбуждения, σ^2 — второй центральный момент спектра. Это приближение хорошо выполняется для центров с сильным тепловыделением. В этом случае [1]

$$\Phi(\omega_0) = (\sqrt{2}/\sigma) [\omega(z) - i(\sqrt{\pi}/2)e^{-z^2}], \quad (33)$$

где

$$\omega(z) = e^{-z^2} \int_0^z e^{x^2} dx \quad (34)$$

— функция Даусона, табулированная в [5].

Подставляя (33) в (26), находим возбуждающий профиль для i -го колебания

$$I_{1,i}(\omega_0) = \left| |Mr|_{\xi_{0i}\omega_i}^2 \frac{\Phi'(z)}{\sqrt{2}\sigma} - P_{n,i} \right|^2 \simeq \quad (35)$$

$$\simeq \left| \omega'(z) + i\sqrt{\pi}ze^{-z^2} + C \frac{\omega_{0r}^2}{\bar{\omega}_{0e}^2 - (\sqrt{2}\sigma z + \omega_{0r})^2} \right|^2,$$

где

$$C = 2\alpha_i(1 - f_{r0})\sigma/(\omega_{0r}f_{r0}\beta_i) \quad (36)$$

при учете формулы (28) и соотношений $|M^r|^2 = -f_{r0}/(2\omega_{0r})$, $P_{n,1,i} := \alpha_i P_{n,0}$ и $\xi_{0i} = \beta_i \sigma/\omega_i$, где β_i^2 определяет относительный вклад колебания i в суммарные стоксовы потери. Отметим, что α_i и β_i могут быть как положительными, так и отрицательными.

На рисунке показан возбуждающий профиль (35) в случаях сложения ($\alpha_i/\beta_i > 0$, $\bar{\omega}_{e0} > \omega_0$) и вычитания ($\alpha_i/\beta_i < 0$, $\bar{\omega}_{e0} > \omega_0$) амплитуд рассеяния. Видно, что эффект интерференции РКР и НКР действительно существенно влияет на форму возбуждающего профиля, причем в обоих случаях по-разному. Из рисунка видно также, что в рассматриваемом случае интерференция РКР и НКР практически не нарушает симметрию возбуждающего контура рассеяния первого порядка относительно частоты максимума полосы поглощения ω_{0r} . Это связано с тем, что в случае НКР амплитуда рассеяния целиком действительна. Поэтому интерферирует только действительная часть амплитуды РКР, которая является четной функцией z . Отметим, что указанная симметрия нарушается, если имеются два близко расположенных электронных уровня, полосы поглощения которых перекрываются. В этом случае интерферировать будут как действительные, так и мнимые части амплитуд рассеяния. Последние же в случае рассеяния первого порядка являются нечетными функциями частоты z .

Отметим в заключение, что асимметрия возбуждающего профиля может быть вызвана также отклонением от приближения Кондона для резонансного перехода [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. Hizhnyakov, V., Tehver, I., Phys. Status Solidi, **21**, № 2, 755—768 (1967); Hizhnyakov, V. V., Rebane, K. K., Tehver, I. J., In: Light Scattering Spectra of Solids, ed. G. F. Wright, Springer, New York, 1969, p. 513—519; Hizhnyakov, V., Tehver, I., In: Physics of Impurity Centres in Crystals, Tallinn, 1972, p. 607—626.
2. Rebane, K., Hizhnyakov, V., Tehver, I., ENSV TA Toim., Füüs. Matem., **16**, № 2, 207—232 (1967); Ребане К. К., Хижняков В. В., В кн.: Дж. Бирман. Пространственная симметрия и оптические свойства твердых тел, т. 2, М., «Мир», 1978, с. 327—350.
3. Овандер Л. Н., Оптика и спектроскопия, **9**, вып. 5, 571—575 (1960).
4. Lax, M., J. Chem. Phys., **20**, 1752 (1952); (русский перевод см. в кн.: Проблемы физики полупроводников, М., Изд-во иностр. лит., 1957, с. 407—423).
5. Карпов К. А., Таблицы функции $w(z) = e^{-z^2} \int_0^z e^{x^2} dx$ в комплексной области, М., Изд-во АН СССР, 1954.
6. Техвер И., Изв. АН ЭССР, Физ. Матем., **17**, № 2, 235—238 (1968).

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
24/X 1979

Experimental

The crystals of RbBr were grown by the method of sixty-fold recrystallization at the Institute of Physics of the Academy of Sciences of the Estonian SSR [1]. The investigation of ionic conductivity showed that the transition to the intrinsic conductivity occurs at 290 °C, which testifies to the high purity of the crystals relative to divalent metals ($C(M^{2+}) < 10^{-4}$ ppm). RbBr platelets of approximately $10 \times 10 \times 1.5$ mm³ freshly cleaved along the {100} planes were studied. The crystal was placed into

INNA REBANE, V. HIZNIAKOV

VALGUSE RESONANTSE JA MITTERESONANTSE HAJUMISE
INTERFERENTS LISANDIKRISTALLIDES

On esitatud resonantse kombinatsioonhajumise teooria, mis arvestab resonantse elektron-seisundi kõrval ka kõigi teiste (mitteresonantsete) seisundite panust polariseeritavuse operaatorisse. On vaadeldud nimetatud seisundite panuste interferentsi mõju hajumise ristlõikes Rayleigh' ja kombinatsioonhajumise joonte ergastusprofiilide kujule.

INNA REBANE, V. HIZHNYAKOV

THE INTERFERENCE OF RESONANT AND NON-RESONANT SCATTERING IN
IMPURITY CENTRES

An excitational profile of resonant Raman scattering of an impurity centre is investigated with regard to the contributions of the resonant as well as non-resonant electronic transitions into the polarizability operator. The vibronic states of the centre are described in an adiabatic approximation. Lattice vibrations are considered to be harmonic. For the resonant polarizability operator the Condon approximation is used, the ground and excited electronic states are taken as non-degenerate, and the shift of the nuclear equilibrium positions at an electronic transition are taken into account.

In the present case the probability amplitude of the Raman scattering consists of two terms, one of which takes account of the resonant scattering and the other, of the non-resonant one. The dependence of these two terms on the exciting frequency differs essentially, which results in an appearance of specific interference peculiarities in the excitational profiles of the Raman scattering.

In the case of the first-order partial spectrum there are two interference possibilities for each normal mode: the probability amplitudes to be summed can be of the same or of opposite signs. The «relative contributions» of the resonant and non-resonant parts of the polarizability into the first-order Raman scattering are estimated and the sharps of the excitational profiles for these two possible cases are calculated.