LÜHIUURIMUSI * КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

И. ТЕХВЕР, В. ХИЖНЯКОВ

К ТЕОРИИ ШИРИНЫ БЕСФОНОННОЙ ЛИНИИ

Одной из важных задач теорий эффекта Мессбауэра и электронно-колебательных переходов является выяснение причин температурного уширения бесфононных линий — линии Мессбауэра и чистоэлектронной линии. В ряде работ (см., напр., [1–3]) было показано, что в эффекте Мессбауэра причиной этого явления может служить изменение массы ядра, а в электронно-колебательных переходах — изменение упругих постоянных решетки в результате фотоперехода. Мы рассмотрели совместное влияние ангармонизма колебаний и изменения положений равновесия атомов, упругих постоянных решетки и массы ядра при электронном либо γ -переходе на ширину этих линий.

Если выполняется условие

$$\Delta\omega_k \ll \Gamma_k \quad (1)$$

($\Delta\omega_k$ — изменение частоты ω_k локального либо псевдолокального колебания в результате перехода, Γ_k — константа распадного затухания его *), то ширина бесфононной линии равна $\gamma_0 + \gamma_1$, где γ_0 — естественная ширина возбужденного уровня, γ_1 — колебательное уширение бесфононной линии, определяемое формулой

$$\gamma_1 = \frac{\pi}{2\hbar^2} \Phi(0). \quad (2)$$

Здесь $\Phi(0) = \Phi(\Omega)|_{\Omega=0}$, $\Phi(\Omega)$ — фурье-образ корреляционной функции $\langle V(t)[V(0) - \langle V \rangle] \rangle$, $V(t) = e^{-iHt/\hbar} V e^{iHt/\hbar}$.

$$V = \Delta U + \frac{\hbar(\vec{k}p_l)}{M_l} - \frac{\Delta M_l}{2M_l^2} p_l^2 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M_l}, \quad (3)$$

$\vec{p}_l$ — оператор импульса γ -радиоактивного ядра номера l , $\vec{k}$ — волновой вектор фотона, ΔM_l — изменение массы M_l ядра l при γ -переходе, ΔU — изменение адиабатического потенциала. В случае электронного перехода $\Delta M_l \simeq 0$, $\vec{k} \simeq 0$.

Если ограничиться квадратичными членами в разложении ΔU по колебательным координатам, то в представлении вторичного квантования оператор V с точностью до несущественной константы можно представить в виде

* Γ_k не включает модуляционные механизмы ангармонического затухания.

$$V = \sum_j (b_j a_j + b_j^* a_j^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_{ij} [(c_{ij} - \varepsilon_{ij}) (a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i a_j) + 2(c_{ij} + \varepsilon_{ij}) a_i^\dagger a_j], \quad (4)$$

где действительная часть b_i и ε_{ij} связаны с параметрами разложения ΔU по операторам рождения ($a_j^\dagger$) и уничтожения (a_j) фононов, мнимая часть b_j и c_{ij} связаны с коэффициентами в членах формулы (3), содержащих p_i .

Таким образом, задача вычисления колебательного уширения бесфононной линии сводится к нахождению фурье-образов корреляторов $\langle a_i^\dagger(t) a_j^\dagger(0) \rangle = \langle a_j(t) a_i(0) \rangle$, $\langle a_i(t) a_j^\dagger(0) \rangle$, $\langle a_i^\dagger(t) a_j(0) \rangle$, $\langle a_i^\dagger(t) a_j^\dagger(t) a_k(0) \rangle = -\langle a_k(t) a_j(0) a_i(0) \rangle$, ... в точке $\Omega = 0$.* Указанные корреляторы были вычислены по методике двухвременных функций Грина [4] в предположении малого внутреннего ангармонизма колебаний [5, 6]. После подстановки их в (2), мы получили следующие формулы для $\gamma_1 = \gamma_\chi + \gamma_\lambda$ (γ_χ и γ_λ — уширения бесфононной линии, связанные с кристаллическими (χ) и локальными (λ) колебаниями соответственно):

$$\gamma_\chi = \frac{\pi}{2\hbar^2} \sum_{x_1 x_2} [\varepsilon_{x_1 x_2} + c_{x_1 x_2} - \sum_k V_{x_1 x_2 k} (b_k^* + b_k) / \hbar \omega_k]^2 \bar{n}_{x_1} (\bar{n}_{x_2} + 1) \delta(\omega_{x_1} - \omega_{x_2}), \quad (5)$$

$$\gamma_\lambda = \frac{\pi}{2\hbar^2} \sum_\lambda [\varepsilon_{\lambda\lambda} + c_{\lambda\lambda} - \sum_k V_{\lambda\lambda k} (b_k^* + b_k) / \hbar \omega_k]^2 \bar{n}_\lambda (\bar{n}_\lambda + 1) / \Gamma_\lambda. \quad (6)$$

Здесь V_{ijk} — коэффициент в разложении гамильтониана по операторам рождения и уничтожения фононов перед $a_i a_j a_k$.

Из полученных формул (5), (6) следует, что учет изменения положений равновесия ядер при электронном либо γ -переходе приводит к перенормировке параметров, определяющих колебательное уширение бесфононной линии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кривоглаз М. А., ФТТ, 6, 1707 (1964); ЖЭТФ, 48, 310 (1965).
2. Каган Ю., ЖЭТФ, 47, 7 (1964).
3. McCumber D. E., Phys. Rev., A134, 299 (1964).
4. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В., ДАН СССР, 126, 1528 (1959); Зубарев Д. Н., УФН, 71, 71 (1960).
5. Хижняков В. В., Изв. АН ЭССР. Сер. физ.-матем. и техн. наук, 14, № 1, 94 (1965).
6. Иванов М. А., Квашнина Л. Б., Кривоглаз М. А., ФТТ, 7, 2047 (1965).

Институт физики и астрономии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
30/V 1966

I. TEHVER, V. HIZNIAKOV

MÄRKUS FONOONVABA JOONE LAIUSE TEOORIA KONTA

I. TEHVER, V. HIZHNYAKOV

ON THE THEORY OF ZERO-PHONON LINE WIDTH

* В работах [1] при рассмотрении уширения бесфононной линии, связанного с линейными членами в (4) и ангармонизмом колебаний, были приняты во внимание лишь диагональные корреляторы $\langle a_j^\dagger(t) a_j(0) \rangle$ и $\langle a_i(t) a_i^\dagger(0) \rangle$. Нondiagonalные корреляторы $\langle a_i(t) a_j^\dagger(0) \rangle$ и $\langle a_i^\dagger(t) a_j(0) \rangle$ дают в γ_1 по порядку величины такой же вклад. Конечный вклад в γ_1 дают также трехчастичные корреляторы.