$$I = 8\beta_0^2 u \exp[\alpha_1(\tau-1)] \int_0^{\tau-1}\int_0^{\tau_1} \mathrm{Re}\left\{(\lambda_{-1}^1\lambda_{-1}^2 + \lambda_0^1\lambda_0^2)\left(\frac{2\alpha_1^2\theta_1^2\theta_2\theta_3}{\Lambda}\right)^3 \times\right.$$

$$\left.\times \exp[-(2\theta_3 + 2\theta_2 - \theta_1 - \alpha_1)(\tau_1 - \tau_2)]\right\} d\tau_1\, d\tau_2,$$

где $u = \exp[-\theta_1(\tau-1)]$,

$$A = \frac{\theta_1^2+\alpha_1^2}{4\theta_1} + \frac{\alpha_1}{2} + \frac{1}{4}\left(\theta_1 + \frac{\alpha_1^2}{\theta_1} - 2\alpha_1\right)u^2; \quad B = \frac{\theta_1^2-\alpha_1^2}{2\theta_1};$$

$$C = \frac{1+u^2}{2}\left[\alpha_1(1+e^{-2\theta_2}) + \frac{(\theta_1^2+\alpha_1^2)(\theta_1^2+\theta_2^2)}{4\theta_1^2\theta_2}(1-e^{-2\theta_2})\right] +$$

$$+\frac{1-u^2}{4\theta_1}\left[(\theta_1^2+\alpha_1^2)(1+e^{-2\theta_2}) + \frac{\alpha_1(\theta_1^2+\theta_2^2)}{\theta_2}(1-e^{-2\theta_2})\right];$$

$$D = \frac{(\theta_1^2-\alpha_1^2)(\theta_2^2-\theta_1^2)}{4\theta_2\theta_1^2}(1-e^{-2\theta_2}); \quad y_{1,2} = -\frac{C}{D} \pm \left(\frac{C^2}{D^2} - u^2\right)^{1/2}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. 3-е изд. М., 1974. [2] Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М., 1978. [3] Макаров А. А., Платоненко В. Т., Тяхт В. В.//ЖЭТФ. 1978. 75. С. 2075—2091. [4] Eberly J. H., Yeh J. J., Bowden C. M.//J. Chem. Phys. 1982. 76. P. 5936—5946. [5] Galbraith H. W., Acherhalt J. R., Milloni P. W.//Ibid. 1983. 78. P. 790—802. [6] Финкельштейн В. Ю.//ЖЭТФ. 1985. 88. С. 1527—1546. [7] Kyrola E., Eberly J. H.//J. Chem. Phys. 1985. 82. P. 1841—1854. [8] Делоне Н. О., Коварский В. А., Масолов А. В., Перельман Н. Ф.//УФН. 1980. 131. С. 617—652. [9] Ахманов С. А., Дьяков Ю. Е., Чиркин А. С. Введение в статистическую радиофизику и оптику. М., 1981.

Поступила в редакцию
25.03.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1987. Т. 28, № 3

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.915; 546.66

РОЛЬ КОЛЛЕКТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ В ФОРМИРОВАНИИ ВУФ СПЕКТРОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

Л. И. Девяткова, А. А. Дружинин, О. Н. Иванова, В. В. Михайлин, С. П. Чернов

(кафедра теоретической физики; кафедра квантовой радиофизики)

Как сообщалось в работе [1], в матрице BaY_2F_8 в спектрах $4f$—$5d$ переходов ионов Tm^{3+}, Er^{3+} и Ho^{3+} со стороны наиболее длинноволновой $5d$-полосы наблюдалась еще одна полоса поглощения. Эта полоса появлялась при концентрации активаторных ионов свыше 5 ат.% и в случае иона Ho^{3+} оставалась хорошо разрешенной вплоть до 100 ат.%. Величина поглощения в дополнительной полосе росла быстрее, чем линейно, с увеличением концентрации активаторов, а интенсивность уменьшалась в ряду $Ho^{3+} \to Er^{3+} \to Tm^{3+}$.

Сверхлинейное увеличение коэффициента поглощения с ростом концентрации свидетельствует о наличии коллективных эффектов. При не очень больших концентрациях (порядка 10—20%) основным коллективным эффектом являются переходы на уровни, принадлежащие парам R^{3+} (где R=Ho, Er, Tm) на соседних узлах. При этом индивидуальные d-уровни расщепляются на пару уровней, один из которых лежит выше, а другой ниже исходного (см. ниже формулу (4)). В идеальном случае, когда расположение замещающих ионов R^{3+} в решетке Браве иттрия является полностью случайным (т. е. замещение R^{3+} в каком-либо узле не влияет на замещение иттрия в соседнем узле), естественно ожидать, что интенсивность парных линий будет пропорциональна квадрату концентрации R^{3+}. В случае, когда между замещающими ионами существует положительная корреляция, т. е. вероятность найти ион R^{3+} больше для тех узлов, которые соседствуют с узлами, уже занятыми R^{3+}, интенсивность парной линии должна расти быстрее, чем квадрат концентрации. Уже при сравнительно небольших концентрациях ($\sim 10\%$) парная линия должна уширяться в сторону меньших энергий за счет образования обширных кластеров, превращаясь в итоге в полосу зонного поглощения.

Рассмотрим более подробно d-состояния, соответствующие паре активаторных ионов, расположенных на соседних узлах решетки. В результате $4f$—$5d$ перехода один из этих ионов имеет конфигурацию остова f^{n-1} при исходной конфигурации f^n. С учетом возможности перескоков d-электронов между ионами пары гамильтониан d-подсистемы может быть записан в виде [2]:

$$H = E_d d_1^+ d_1 + (E_d + U) d_2^+ d_2 + B (d_1^+ d_2 + d_2^+ d_1), \tag{1}$$

где E_d — энергия d-уровня при конфигурации остова f^{n-1}; U — энергия взаимодействия d-электрона с f-дыркой; B — матричный элемент перескока d-электрона; d_1 и d_2 — операторы уничтожения d-электрона на ионах с конфигурациями остова f^{n-1} и f^n соответственно; d_1^+ и d_2^+ — операторы рождения d-электрона на ионах с конфигурациями остова f^{n-1} и f^n соответственно.

Энергия двух одноэлектронных состояний с волновыми функциями вида

$$(c_1 d_1^+ + c_2 d_2^+) |0\rangle \tag{2}$$

определяется секулярным уравнением

$$\begin{vmatrix} E_d - E & B \\ B & E_d + U - E \end{vmatrix} = 0, \tag{3}$$

откуда энергии уровней

$$E_\pm = E_d + \frac{1}{2} (U \pm \sqrt{U^2 + 4B^2}). \tag{4}$$

Будем интересоваться только нижним уровнем (знак минус в (4)), поскольку наблюдение верхнего уровня экспериментально затруднено из-за большой величины поглощения, обусловленного следующими d-состояниями.

Интенсивность перехода на уровень E_- пропорциональна квадрату модуля коэффициента c_1 в (2) [3]. Для него получаем

$$|c_1|^2 = \eta^2/(1+\eta^2), \tag{5}$$

где $\eta = 2B/\sqrt{U^2 + 4B^2} - U$.

При $B \ll U$, $E-E_d \simeq B^2/U$, $\eta = U/B \to 1$, т. е. $|c_1|^2 \to 1$. Иными словами, в этом случае нижнее отщепленное состояние является близким к исходному d-состоянию иона; сдвиг энергии невелик и определяется сравнительно редкими (из-за большой величины U) перескоками электрона на соседний узел с конфигурацией f^n и обратно.

При $B \gg U$, $E-E_d \simeq B$, $\eta = 1$, т. е. $|c_1|^2 \to 1/2$. При этом волновые функции узельных d-состояний полностью гибридизованы, и электрон, находящийся на нижней компоненте расщепленного уровня, с практически равной вероятностью может находиться на обоих узлах.

Таким образом, по мере убывания энергии взаимодействия U d-электрона с f-дыркой (при неизменном B) сдвиг нижнего уровня E_- относительно исходного уровня E_d возрастает вплоть до $\Delta U \simeq B$, а интенсивность его уменьшается до половины исходной.

Отметим, что наблюдаемый экспериментально сдвиг уровня относительно исходного d-уровня $\sim 0{,}3$ эВ ($2{,}4 \cdot 10^3$ см$^{-1}$) получается при физически разумных значениях параметров $B \sim 0{,}5 \div 1$ эВ, $U \sim 1 \div 5$ эВ.

Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными, если предположить, что значение U в иттербиевой подгруппе редкоземельных элементов убывает с ростом порядкового номера N вследствие убывания обменной компоненты внутриатомного кулоновского взаимодействия. Действительно, интенсивность дополнительной полосы поглощения, как уже отмечалось, заведомо уменьшается в ряду $Ho^{3+} \to Er^{3+} \to Tm^{3+}$; сдвиг положения этой полосы относительно исходного уровня для Ho^{3+} меньше, чем для Er^{3+} (для Ho^{3+}: $E_d - E_- = 2{,}6 \cdot 10^3$ см$^{-1}$, для Er^{3+}: $E_d - E_- = 2{,}9 \cdot 10^3$ см$^{-1}$). Сдвиг положения дополнительной полосы иона Tm^{3+} измерить затруднительно.

При 100%-ной концентрации R^{3+} гибридизация d-состояний, соответствующих различным ионам R^{3+}, приводит, как известно, к размытию системы d-уровней в d-зону с шириной $\sim zB$, где z — координационное число [3].

Характер поглощения матрицами типа BaR_2F_8 (где R=Ho, Er, Tm) вблизи края d-зоны также определяется соотношением матричного элемента перескоков d-электронов B и энергии U кулоновского взаимодействия d-электрон — f-дырка. Не имея в виду последовательно излагать микроскопическую теорию $f-d$ экситонов [4], кратко опишем характер спектра при различных значениях параметра B/U.

Если параметр B/U мал, существуют стационарные экситонные состояния, лежащие ниже дна d-зоны. В этих состояниях d-электрон сильно связан с f-дыркой и вероятность нахождения его на достаточно удаленных от нее узлах мала.

По мере роста отношения B/U экситонный уровень приближается к дну d-зоны и, наконец, при определенном критическом значении параметра (зависящем от типа решетки) сливается с дном d-зоны, превращаясь в квазистационарный.

Таким образом, при достаточно больших значениях U, сравнимых с шириной d-зоны, на длинноволновом краю зонного поглощения должна наблюдаться отщепленная полоса, соответствующая возбуждению $f-d$ экситонных состояний. По мере уменьшения U она должна сливаться с краем зонного поглощения.

Если, как это уже делалось, предположить, что U убывает с ростом N, то подобное описание согласуется с полученными экспериментальными результатами. Действительно, как уже отмечалось, для иона Ho^{3+} в матрице $BaHo_2F_8$ был экспериментально зарегистрирован четкий провал между отщепленной полосой и d-зоной; в случае же

$BaEr_2F_8$ и $BaTm_2F_8$ существование подобного провала зарегистрировать не удалось.

Таким образом, можно сделать вывод, что край собственного поглощения кристалла $BaHo_2F_8$ определяется переходами в $f-d$ экситонные состояния, отщепленные от d-зоны. Края собственного поглощения кристаллов $BaEr_2F_8$ и $BaTm_2F_8$ определяются переходами в d-зону редкоземельных ионов, а детальная структура края поглощения этих кристаллов требует дальнейшего изучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Девяткова Л. И. и др.//ДАН СССР. 1985. 283. С. 1339—1342. [2] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1963. [3] Агранович В. М. Теория экситонов. М., 1968. [4] Кикоин К. Н.//ЖЭТФ. 1983. 85. С. 1000—1016.

Поступила в редакцию
05.03.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1987. Т. 28, № 3

ГЕОФИЗИКА

УДК 550.5

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФЕРЕНЦИАЦИЯ ВЕЩЕСТВА В ОБОЛОЧКЕ ЗЕМЛИ

М. В. Авдулов

(кафедра физики Земли)

Горную породу, входящую в состав земной оболочки, можно рассматривать как смесь кристаллов двух групп. К первой группе относятся кристаллы, которые при определенных значениях давления и температуры испытывают полиморфные превращения с изменением объема. Ко второй группе относятся кристаллы, не испытывающие фазового перехода, их можно рассматривать как сплошную среду, заполняющую пространство между кристаллами первой группы. Если в мантии Земли температура меняется по периодическому закону, между пульсирующими в процессе полиморфных превращений кристаллами возникают силы взаимного притяжения (эффект Бьеркнеса), что приводит к разделению земной оболочки на минералогические фракции [1]. Вопрос о причинах периодических изменений температуры в настоящей работе не обсуждается, поскольку он рассмотрен в [2].

Выделим внутри мантии объем, в котором температура меняется по закону синуса. Тогда смещение i-го кристалла в системе из N синфазно пульсирующих кристаллов за время одного фазового перехода определяется выражением [2]:

$$S_i = knr. \tag{1}$$

Здесь k — безразмерный коэффициент, зависящий от числа Рейнольдса: $k=0{,}5\ (\Delta R/R)^2$ — случай больших чисел Рейнольдса, $k=\rho\Delta R\dot{R}/3\eta$ — случай малых чисел Рейнольдса, R — радиус кристалла, ΔR — величина изменения радиуса кристалла, $\dot{R}$ — скорость изменения радиуса кристалла, η — коэффициент динамической вязкости, ρ — плотность жидкости, r — расстояние от центра зоны периодических изменений