

Рис. 3. Осцилляции амплитуд волн при $u_2/u_c = 5$, $\beta_2/\beta_3 = 0,1$

Появление осцилляций соответствует движению по интегральной кривой с функцией (2).

Отметим, что если соотношение амплитуд слабых волн не соответствует рассчитанному по теории возмущений, то локализованные состояния переходят в режим пространственных биений.

Работа выполнена при поддержке программ «Ведущие научные школы» (грант 96-15-97247), «Университеты России» (грант 5218) и INTAS 97-0581.

Литература

1. Сухоруков А.П. Нелинейные волновые взаимодействия в оптике и радиофизике. М., 1988.
2. Деревянкин С.В., Сухоруков А.П. // Изв. РАН, сер. физ. 1998. **62**. С. 12.
3. Данеллюс Р., Пискарская А., Сируткайтис В.И. и др. Параметрические генераторы света и пикосекундная спектроскопия. Вильнюс, 1983.
4. Akhmanov S.A., Chirkin A.S., Drabovich K.N. и др. // IEEE J. Quant. Electron. 1968. **QE-4**. P. 598.
5. Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П. Теория волн. 2-е изд. М., 1990.

Поступила в редакцию
15.12.98

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.37

СПЕКТРЫ КРОССЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

А. Н. Васильев, О. И. Баум

(кафедра оптики и спектроскопии)

Исследуются теоретические модели, описывающие спектры кросслюминесценции в приближении сильной связи, в частности модель свободной и локализованной остоной дырки. В последнем случае изучаются одноузловая и двухузловая локализации. Анализируются изменения спектров кросслюминесценции в зависимости от параметров предлагаемых моделей.

Для ряда ионных кристаллов, состоящих из тяжелых катионов и легких анионов, оже-распад является запрещенным, поэтому остоные дырки переходят в валентное состояние путем испускания ультрафиолетового излучения с характерным временем затухания порядка 1 нс (обыкновенный оже-распад имеет характерное время порядка 1 фс). Этот излучательный процесс и называется кросслюминесценцией (Auger-free luminescence) [1].

В предшествующих работах по кросслюминесценции, например в [2–4], были представлены различные методы расчета спектров, однако они не позволяют проанализировать на качественном уровне влияние параметров зонной структуры и влияние локализации на изменение характеристик кросслюминесценции в широком диапазоне параметров. Такой анализ был проделан в настоящей работе. Спектры бы-

ли рассчитаны на основании приближения сильной связи для BaF_2 в приближении одноэлектронных переходов.

В работах [5–7] показано, что решение секулярного уравнения в приближении сильной связи с учетом трехкратного вырождения для p -орбиталей двух разных атомов одного типа (обозначенных как a и a') зависит только от двух параметров, являющихся энергиями σ - и π -взаимодействий p -орбиталей атомов: $W_\sigma = \langle \psi_\sigma^a | \hat{H} | \psi_\sigma^{a'} \rangle$ и $W_\pi = \langle \psi_\pi^a | \hat{H} | \psi_\pi^{a'} \rangle$. При подборе этих параметров использовалась связь между ними: $W_\pi = W_\sigma/8$ [5], и справедливость этого соотношения была подтверждена численными расчетами авторов, основанными на сравнении интегралов перекрытия волновых функций, которые были построены на водородоподобных функциях, локализованных на разных атомах.

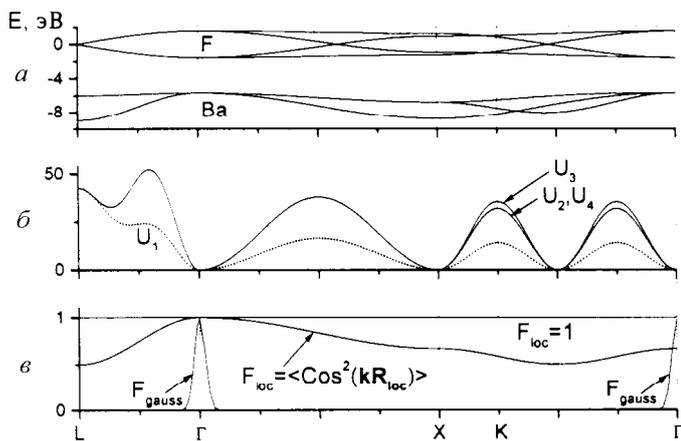


Рис. 1. Закон дисперсии валентной и остоной зон BaF_2 (а), частичный вклад матричных элементов $U_1 \div U_4$ (б), функция распределения остоных дырок (в) для двухузельной локализации ($F_{\text{loc}} = \langle \cos^2(\mathbf{kR}_{\text{loc}}) \rangle$), одноузельной локализации ($F_{\text{loc}} = 1$) и свободных дырок ($F_{\text{loc}} = F_{\text{Gauss}}$)

В настоящей работе численные значения параметров W_σ и W_π определялись путем построения дисперсионных кривых для валентной и остоной зон и сравнения соответствующих плотностей состояния с экспериментальными спектрами рентгеновской фотоэмиссии [8] и известными теоретическими расчетами $E(\mathbf{k})$ в хорошо изученных направлениях зоны Бриллюэна. Было получено, что для валентной зоны BaF_2 $W_\sigma = 0,459$ эВ, для остоной зоны $W_\sigma = 0,413$ эВ (рис. 1, а).

Были рассмотрены две модели: модель свободной дырки, имеющей бoльцмановское распределение по энергии вблизи потолка остоной зоны, и модель локализованной дырки, занимающей бoльшую часть объема зоны Бриллюэна. Кроме того, исследовался вклад свободных и локализованных остоных носителей заряда в спектры свечения.

Полученная температурная зависимость спектров кросслюминесценции в случае делокализованных остоных дырок показала, что лишь при очень высоких температурах, не имеющих физического смысла (на порядок превышающих температуру плавления рассматриваемых кристаллов), ширина линий в спектрах сравнима с экспериментальной, при более же низких температурах имеется набор узких линий типа δ -функций, которые не наблюдаются в эксперименте [9]. Широкие спектры соответствуют достаточно плоским дисперсионным кривым на потолке остоной зоны. В частном случае можно подобрать величины параметров W_σ и W_π для получения такого закона дисперсии, но, по-видимому, этот случай на практике не реализуется. Это позволило при рассмотрении кросслюминесценции отдать предпочтение модели локализованных остоных носителей заряда. При расчете параметров этой модели учитывалось, что остоно-валентные переходы начинают происходить лишь после полной термализации остоной дырки, что соответствует полной релаксации системы (время релаксации остоной дырки

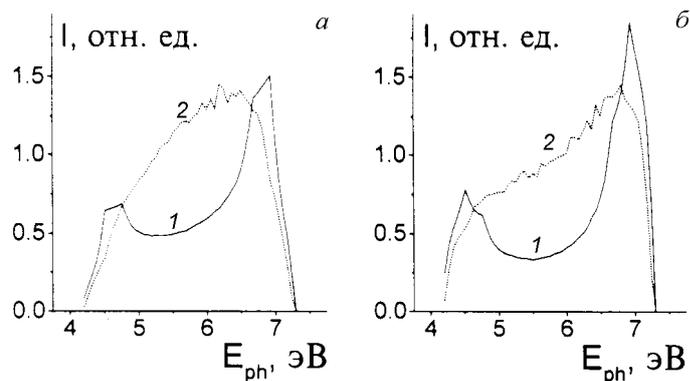


Рис. 2. Рассчитанные спектры BaF_2 в случаях одноузельной (а) и двухузельной (б) локализации без учета (1) и с учетом (2) матричных элементов перехода

к потолку зоны $\sim 10^{-12}$ с, радиационное время ее жизни $\sim 10^{-9}$ с) [10]. Таким образом, переходы происходят из всех состояний валентной зоны в узкую область, находящуюся чуть выше потолка остоной зоны.

При рассмотрении модели локализованных остоных дырок уделялось внимание двум видам локализации: 1) одноузельной (локализация на одном атоме решетки), описываемой δ -функцией и соответствующей «равномерной» размазанности остоных дырок по зоне Бриллюэна; 2) двухузельной (локализация на двух атомах), описываемой суммой двух δ -функций и соответствующей функции распределения остоных дырок: $\langle \cos^2(\mathbf{kR}_{\text{loc}}) \rangle$, где \mathbf{R}_{loc} учитывает направление, вдоль которого происходит локализация (рис. 1, в). Из-за различия функций распределения в двух этих случаях возникают дополнительные особенности в расчетном спектре для двухузельной локализации (рис. 2).

В первых работах, относящихся к кросслюминесценции, предполагалось, что спектры свечения отражают плотность состояний валентной зоны. Но в действительности это справедливо лишь в случае одноузельной локализации без учета дипольного взаимодействия, описываемого матричными элементами спектральных переходов, построенных на атомных волновых функциях аниона и катиона, между внутренними оболочками которых и происходят рассматриваемые переходы. Комбинации из матричных элементов (параметров предложенных моделей) были изучены с точки зрения теории групп, что позволило свести их многообразие к минимуму. Для системы из двух различных атомов кристалла получаем не равными нулю следующие матричные элементы $\langle \psi^a | \hat{\mathbf{R}} | \psi^c \rangle$:

$$U_1 = \langle \psi_\sigma^a | \hat{\mathbf{R}}_\sigma | \psi_\sigma^c \rangle, \quad U_2 = \langle \psi_\pi^a | \hat{\mathbf{R}}_\pi | \psi_\pi^c \rangle,$$

$$U_3 = \langle \psi_\pi^a | \hat{\mathbf{R}}_\sigma | \psi_\pi^c \rangle, \quad U_4 = \langle \psi_\pi^a | \hat{\mathbf{R}}_\pi | \psi_\sigma^c \rangle,$$

где ψ^a и ψ^c — волновые функции p -типа, локализованные на анионе (а) и катионе (с), а \mathbf{R}_σ и \mathbf{R}_π — проекции оператора $\hat{\mathbf{R}}$ на направление, в ко-

тором происходит остожно-валентный переход, и на перпендикулярное к нему направление соответственно. В расчете учитывались относительные величины матричных элементов, найденные для водородоподобных функций: $U_1 = 1$, $U_2 = 0,226$, $U_3 = -0,113$ и $U_4 = -0,451$.

В случае одноузельной локализации (рис. 2, а, кривая 1) спектр имеет вид плотности состояний валентной зоны (домноженной на квадрат частоты перехода), так как $F_{loc} = 1$, что указывает на равноценное участие в спектральных переходах состояний из всей зоны Бриллюэна, формирующих остожную дырку. В случае двухузельной локализации $F_{loc} = \langle \cos^2(\mathbf{k}\mathbf{R}_{loc}) \rangle$ (рис. 1, в) и часть состояний, расположенных на периферии зоны Бриллюэна, вносит меньший вклад в спектр. На этом фоне усиливаются переходы в Γ -точке и вокруг нее, что проявляется в обострении двух линий на краях спектра (рис. 2, б, кривая 1). Учет зависимости матричного элемента перехода из валентного в остожное состояние от положения в зоне Бриллюэна приводит к тому, что переходы в некоторых точках высокой симметрии не наблюдаются. Это соответствует более гладкой форме спектров и исчезновению особенностей Ван-Хова (рис. 2, а, б, кривые 2). В частности, в Γ -точке переходы запрещены, что согласуется с p - p -характером перехода.

Рассмотренные выше модели могут быть обобщены на случай бинарных кросслюминесцентных кри-

сталлов с такими же подрешетками, как у BaF_2 (напр., $CsCl$, RbF и др.). Необходимо сказать, что предложенные выше модели не дают хорошего соответствия теоретических и экспериментальных спектров кросслюминесценции, но позволяют сопоставить изменение основных характеристик спектров с изменением параметров моделей.

Литература

1. Александров Ю.М., Махов В.Н., Родный П.А. и др. // ФТТ. 1984. **26**, №9. С. 2865.
2. Ермаков Л.К., Родный П.А., Старостин Н.В. // ФТТ. 1991. **33**, №9. С. 2542.
3. Соболев А.Б., Валбис Я.А., Бикметов И.Ф. // Изв. Латв. АН, сер. физ. 1990. №4. С. 45.
4. Kayanuma Y., Kotani A. // J. Electr. Spectr. and Rel. Phen. 1996. **79**. P. 219.
5. Pantelides S.T. // Phys. Rev. 1975. **B11**, No. 12. P. 5082.
6. Ellialtioglu S., Wolfram T. // Ibid. 1977. **B15**, No. 12. P. 5909.
7. Ellialtioglu S., Wolfram T. // Ibid. 1978. **B18**, No. 8. P. 4509.
8. Makhov V. N. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1991. **A308**. P. 187.
9. Itoh M., Kamada M., Ohno N. // J. Phys. Soc. Japan. 1997. **66**, No. 8. P. 2502.
10. Makhov V.N., Terekhin M.A., Munro J.H. et al. // J. Luminescence. 1997. **72-74**. P. 114.

Поступила в редакцию
07.12.98

УДК 535.41

ПОВЕРХНОСТНЫЕ И КРАЕВЫЕ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНЫ И КОЛЬЦЕВИДНЫЕ СПЕКЛЫ

Ю. В. Васильев, А. В. Козарь, Е. Ф. Курицына, А. Е. Лукьянов

(кафедра общей физики; кафедра радиофизики; кафедра физической электроники)

Экспериментально обнаружено новое явление в оптике спеклов — местное резонансное усиление интенсивности кольцевидных краевых лазерных спеклов. Это явление объясняется возбуждением и срывом поверхностных и краевых плазмон-поляритонов на прямом заостренном крае лезвия в пучке лазерного излучения.

В опытах по дифракции гауссова пучка лазерного излучения на прямом заостренном крае полубесконечного металлического экрана (лезвие безопасной бритвы) обнаружен новый тип краевых лазерных спеклов (КЛС) — кольцевидные спеклы; высказано предположение, что физический механизм их образования импедансный [1]. Этот механизм сложен и непривычен для оптики спеклов, которая в основном имеет дело с узкой областью частот ω видимого лазерного излучения [2].

При падении света на поверхность металла происходит не только его частичное поглощение в тонком скин-слое металла. Падающее лазерное излучение возбуждает сильные поверхностные и краевые токи. Они эффективно излучают с внешней стороны металла, и этим обуславливается отражение света и/или его диффузное рассеяние, которое порождает

лазерные спеклы. Но в определенных условиях падающее излучение может частично преобразовываться в поверхностные и краевые плазмоны и поляритоны [3], которые способны внести дополнительный вклад в формирование спеклов.

Цель работы — экспериментально обнаружить оптические явления, подтверждающие существование такого вклада в картине КЛС.

В настоящей работе сообщается о новом явлении в оптике спеклов — местном резонансном усилении интенсивности кольцевидных спеклов. Оно обнаружено в опытах на голографической измерительной установке УИГ-22М при работе с аргоновым лазером типа ЛГН-503 (эффективный диаметр гауссова пучка монохроматического излучения 2,5 мм, длина волны $\lambda = 514,5$ нм, пространственная мода TEM_{00}). Прин-