

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫЙ МЕХАНИЗМ ВЫНУЖДЕННЫХ ДИПОЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПРИМЕСНЫХ ИОНАХ В КРИСТАЛЛАХ

Ф. П. САФАРЯН, Е. Ф. САФАРЯН

Армянский педагогический институт им. Х. Абовяна

(Поступила в редакцию 15 мая 1996 г.)

Показано, что в сложных диэлектрических примесных кристаллах (в элементарных ячейках которых имеются несколько неэквивалентных положений для примесного иона) ЭФВ индуцирует дипольные переходы между примесными электронными уровнями (между $3d$, $4f$ уровнями), которые в дипольном приближении запрещены по правилу четности. Найдены эффективные дипольные моменты этих переходов и вычислены соответствующие им вероятности спонтанных переходов (и, тем самым, времена жизни уровней). Получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными.

1. Введение

Известно, что в оптических спектрах примесных диэлектрических кристаллов, активированных ионами переходных и редкоземельных элементов, имеются довольно интенсивные спектральные линии, на которых в настоящее время работают многие твердотельные лазеры. Известно также, что соответствующие этим линиям электронные переходы, которые происходят между имеющими одинаковую четность уровнями ($3d$ или $4f$ уровни) в дипольном приближении запрещены по правилу Лапорта, а оставшиеся переходы более высоких мультипольных порядков (квадрупольный, октупольный, магнитно-дипольный и т. д.) настолько слабы, что с их помощью невозможно объяснить факт существования довольно больших интенсивностей у этих линий. Кроме того, указанные электронные переходы, происходящие в разных примесных центрах в противоположных направлениях, могут стать причиной эффективной передачи энергии электронного возбуждения между ионами, вероятность которой, как показывает эксперимент, зависит от расстояния R между ионами по закону, присущему диполь-дипольной передаче энергии (R^{-6}). Это заставило думать (и по этому поводу впервые высказался Ван-Флек [1]), что в следующих порядках теории возмущений дипольные запреты на электронные переходы снимаются. При этом в роли оператора возмущения, перемешивающего уровни основной конфигурации ($3d$ или $4f$) с более высокорасположенными уровнями конфигураций противоположной четности, выступают или нечетные компоненты потенциала кристаллического поля (КП), или нечетные колебания решетки. Эта идея

в дальнейшем развивалась в работах [2, 3] и в настоящее время широко применяется для интерпретации экспериментальных данных по интенсивности спектральных линий и по передаче энергии между примесными ионами. Однако в работах [4, 5] было показано, что в некоторых кристаллических структурах, где в элементарной ячейке имеются несколько неэквивалентных положений примесного иона и его ближайшего окружения (например, в элементарной ячейке граната имеется 24 таких положения), осуществляется довольно эффективная передача энергии, которая индуцируется четными компонентами потенциала электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), связывающего друг с другом электронные уровни одинаковой четности ($3d$ или $4f$ уровни). Вероятность такой передачи тоже оказывается зависящей от расстояния по закону диполь-дипольной передачи (R^{-6}). Это наводит на мысль, что наряду с рассматриваемыми выше двумя механизмами вынужденных дипольных переходов (ВДП), для указанных кристаллических систем имеется также другой механизм снятия запрета на дипольные переходы, оператором возмущения для которого являются четные компоненты гамильтониана ЭФВ.

В следующем разделе, в формуле для энергии резонансного взаимодействия ионов, мы выделим член, соответствующий эффективному дипольному моменту перехода между примесными электронными уровнями одинаковой четности, и проведем количественные вычисления этих дипольных моментов и соответствующих им вероятностей спонтанных переходов из возбужденных примесных электронных состояний (и тем самым времена жизни уровней).

2. Вероятность электрон-фононной передачи энергии

Связь между примесными ионами в кристалле осуществляется через ЭФВ. Первый ион (донор), находящийся в возбужденном электронном состоянии (λ'), испускает (поглощает) виртуальный фонон решетки, а другой ион (акцептор), находящийся от первого на расстоянии R , поглощает (испускает) тот же фонон и из основного электронного состояния μ переходит в возбужденное состояние μ' . В результате такого обмена виртуальных фононов между ионами и решеткой энергия первоначального возбуждения безызлучательно переходит от донорного иона к акцепторному. Этот процесс в точности напоминает процесс обмена виртуальных фотонов ионами, взаимодействующими друг с другом по закону Кулона. Вероятность ЭФ передачи, как известно, можно представить в виде [4, 6]

$$W_{\lambda' \rightarrow \lambda} = 2\pi |H_{int}|^2 \delta(\mathcal{E}_{\lambda', \lambda} - \mathcal{E}_{\mu', \mu}), \quad (1)$$

где

$$H_{int} = \sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(1)}(\lambda', \lambda) B_{\alpha}^{(1)}(\mu', \mu) \frac{2\hbar\omega_{\alpha}}{(\mathcal{E}_{\lambda', \lambda})^2 - (\hbar\omega_{\alpha})^2} \quad (2)$$

представляет собой энергию резонансного взаимодействия ионов.

В формулах (1), (2) введены обозначения: $\mathcal{E}_{\lambda,\lambda'} = \mathcal{E}_{\lambda'} - \mathcal{E}_{\lambda}$, где $\mathcal{E}_{\lambda}$ — энергия примесного электронного состояния λ , $\hbar\omega_{\alpha}$ — энергия фонона типа α (α нумерует два индекса: $\alpha = \{s, k\}$), где s — мода, а k — волновой вектор колебаний), $B_{\alpha}^{(1)}(\lambda', \lambda)$ — коэффициенты ЭФВ. Для существенного сокращения расчетов целесообразно исходить из гамильтониана ЭФВ длинноволнового приближения ($kR_0 \ll 1$), коэффициенты которого можно представить в виде [7]

$$B_{\alpha}^{(1)}(\lambda', \lambda) = V \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2Mv_0^2}} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{\pi e^2 z}{R_0^{l+1}} \right) V_{lm} \langle \lambda' | \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i Y_{lm}^{(i)} | \lambda \rangle Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \quad (3)$$

где M — масса кристалла, v_0 — средняя скорость акустических волн в кристалле, R_0 — радиус первой координационной сферы, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции оптического электрона примеси, $Y_{lm}(\theta', \varphi')$ — сферические функции волнового вектора акустических волн в кристалле, V_{lm} — численные коэффициенты, z — эффективный заряд ионов первой координационной сферы. В формуле (3) суммирование по i ведется по эквивалентными оптическим электронам, число которых равно N .

Коэффициенты ЭФВ донора и акцептора связаны друг с другом посредством выражения

$$B_{\alpha}^{(1)}(\mu', \mu) = B_{\alpha}^{(1)}(\lambda', \lambda) \exp(ikR). \quad (4)$$

В формуле (3) сохранены лишь отличные от нуля четные компоненты с $l=2, 4, 6$.

Из формулы (1) следует, что при $R=0$ формула для энергии резонансного взаимодействия переходит в формулу для ЭФ сдвига спектральной линии перехода $|\lambda \rightarrow \lambda'|$, происходящего в одном примесном центре.

Подставляя в формулу (1) выражения (3) и (4), для энергии резонансного взаимодействия ионов получим

$$H_{int} = \frac{\hbar}{Mv_0^2} \sum_{l=2,4,6} \left(\frac{\pi e^2 z}{R_0^{l+1}} \right)^2 \cdot J_{\lambda,\lambda'} \sum_m V_{lm} \langle \lambda' | \sum_i \mathcal{E}_i^2 Y_{lm}^{(i)}(\theta, \varphi) | \lambda \rangle Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \quad (5)$$

где

$$J_{\lambda,\lambda'} = \sum_s \sum_k \frac{\omega_s^2(k) \exp(ikR)}{(\Delta_{\lambda,\lambda'})^2 - \omega_s^2(k)}, \quad \Delta_{\lambda,\lambda'} = \frac{\mathcal{E}_{\lambda,\lambda'}}{\hbar}. \quad (6)$$

Зависимость H_{int} от R фигурирует в интеграле (6), решением которого занимались многие авторы (см. [4, 5] и цитируемые там работы). Установлено, что правильная зависимость получается лишь в случае, когда интеграл (6) берется в пределах первой зоны Бриллюэна. Нетрудно показать, что при условии $\Delta_{\lambda,\lambda'} \gg \omega_{\alpha}$, которое реализуется в рассматриваемом здесь случае передачи электронной энергии, решение интеграла (6) имеет вид:

$$J_{\lambda,\lambda} = \frac{9n_0 v_0^2}{\Delta_{\lambda,\lambda}^2 \pi^3} V \left\{ \frac{\pi}{a^3 R_x} \sin\left(\frac{\pi R_x}{a}\right) + \frac{2\pi}{a R_x^3} \cos\left(\frac{\pi R_x}{a}\right) - \frac{2}{R_x^3} \sin\left(\frac{\pi R_x}{a}\right) \right\} \frac{1}{R_y R_z} \sin\left(\frac{\pi R_y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi R_z}{a}\right), \quad (7)$$

где n_0 —число атомов в элементарной ячейке, V —объем кристалла, a —размер элементарной ячейки, R_x, R_y, R_z —декартовы координаты расстояния R между ионами. Для предельных значений R из формулы (7) получим:

$$J_{\lambda,\lambda}(R \rightarrow 0) = \frac{3n_0 V}{a^3} \left(\frac{\omega_m}{\Delta_{\lambda,\lambda}} \right)^2, \quad (8)$$

$$J_{\lambda,\lambda}(R \rightarrow \infty) = \frac{6Vn_0}{\pi^3} \left(\frac{\omega_m}{\Delta_{\lambda,\lambda}} \right)^2 \cdot f(R_x, R_y, R_z), \quad (9)$$

где $\omega_m = v_0 \left(\frac{\pi}{a} \right) = v_0 k_m$ —максимальная частота колебаний (k_m —максимальный импульс колебаний) решетки,

$$f(R_x, R_y, R_z) = \frac{1}{R_x R_y R_z} \sin\left(\frac{\pi R_x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi R_y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi R_z}{a}\right). \quad (10)$$

Из формулы (10) следует, что при больших расстояниях H_{int} зависит от расстояния R по закону $\sim 1/R^3$ (а вероятность перехода энергии (1) $\sim 1/R^6$). Поскольку такое взаимодействие осуществляется между электрическими диполями, то естественно предполагать, что рассматриваемый здесь механизм обмена виртуальных фононов между ионами идентичен механизму взаимодействия двух электрических диполей, индуцируемых в примесных центрах под воздействием ЭФВ. Выражение для этих дипольных моментов мы находим, сравнивая формулу (5) с известной формулой для энергии резонансного диполь-дипольного взаимодействия:

$$H_{int}^{(dip)} = \frac{1}{R^3} |P_{\lambda,\lambda}|^2.$$

На основе формул (5) и (9), подставляя в них среднее значение для функции $f(R)$:

$$\overline{f(R_x, R_y, R_z)} = (\overline{f^2(R_x, R_y, R_z)})^{1/2} = \sqrt{\frac{3 \cdot 5 \cdot 7}{8}} \cdot \frac{1}{R^3},$$

получим следующее выражение для эффективного дипольного момента:

$$|P_{\lambda,\lambda}|^2 = \sqrt{\frac{3 \cdot 5 \cdot 7}{8}} \frac{9n_0}{\pi^3 \rho v_0^3} \left(\frac{\omega_m}{\Delta_{\lambda,\lambda}} \right)^2 \sum_{l=2,4,6} \left(\frac{ze^3 \pi}{R_0^{l+1}} \right)^2 \times \\ \times \left| \sum_m V_{lm} \langle \lambda' | \sum_i r_i^l Y_{lm}^{(l)} | \lambda \rangle Y_{lm}^*(\theta', \varphi') \right|^2. \quad (11)$$

Отметим, что как следует из формул (9) и (10), энергия резонансного взаимодействия отлична от нуля лишь в случаях, когда акцепторный ион вместе со своим ближайшим окружением занимает определенное положение в элементарной ячейке $R_x, R_y, R_z \neq an$ (где $n=1, 2, \dots$) (считается, что донор находится в узле решетки). Понятно, что чем сложнее элементарная ячейка (например, в ИАГ имеется 24 таких положения), тем легче выполняется это условие.

Зная $P_{\lambda'\lambda}$, можно найти соответствующую вероятность спонтанного перехода по формуле

$$A_{\lambda'\lambda} = \frac{4\omega_{\lambda'\lambda}^3}{3\hbar c^3} \frac{n(n^2+2)^2}{9} |P_{\lambda'\lambda}|^2, \quad (12)$$

где n —показатель преломления среды, c —скорость света.

Выражения для неадиабатического сдвига спектральной линии перехода $|\lambda' \rightarrow \lambda|$ следуют из формулы (2), если в ней подставить $R=0$. Учитывая, что интеграл (6) в этом предельном случае имеет вид (8), для сдвига получим:

$$\Delta \mathcal{E}_{\lambda'\lambda} = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 |P_{\lambda'\lambda}|^2, \quad (13)$$

где $P_{\lambda'\lambda}$ определяется формулой (11).

3. Количественные вычисления

Основной формуле (11) можно придать в вычислительном отношении более удобный вид, учитывая, что конкретные расчеты проводятся для примесных редкоземельных ионов (TR^{3+} -ионов).

Известно, что КП слабо влияет на хорошо защищенную от внешних воздействий внутреннюю $4f$ -оболочку, поэтому электронные спектры свободных TR^{3+} -ионов в КП претерпевают малые изменения. В результате получаются те же электронные термы $^{2S+1}L_J$ (где L, S —соответственно орбитальный и спиновый моменты, J —полный момент) свободных ионов, но которые в КП дополнительно расщепляются на штарковские подуровни. Так что здесь индексы (λ, λ') нумеруют штарковские состояния, волновые функции для которых можно найти из теоретико-групповых соображений (электронные состояния можно классифицировать по неприводимым представлениям точечной группы действующего на примесный ион локального КП). Известно, что их можно представить в виде суперпозиций из волновых функций свободного иона $\langle (^4f)^N \times SLJM |$, где N —число эквивалентных электронов в $4f$ -оболочке, M —проекция полного момента, x —дополнительные квантовые числа, характеризующие данный уровень.

В входящих в формулу (11) матричных элементах выделим радиальные и угловые части, переходя одновременно от сферических функций Y_{lm} к единичным тензорным операторам U_{lm} посредством формулы

$$\langle (^4f)^{N_x} S' L' J' M' | \sum_{i=1}^N r_i^l Y_{lm}^{(i)} | (^4f)^{N_x} S L J M \rangle = \langle ^4f | r^l | ^4f \rangle \times \\ \times \langle f || Y_l || f \rangle \langle (^4f)^{N_x} S' L' J' M' | U_{lm} | (^4f)^{N_x} S L J M \rangle, \quad (14)$$

где

$$\bar{r}^l = \langle ^4f | r^l | ^4f \rangle = \int_0^\infty R_{4f}^2(r) r^{l+2} dr, \\ \langle f || Y_l || f \rangle = (-1)^{l+f} \left(\frac{(2f+1)(2l+1)}{4\pi} \right)^{1/2} C_{f0, l0}^f,$$

где $R_{4f}(r)$ — радиальная часть волновой функции $4f$ электрона, $C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{l m}$ — коэффициенты Клебша-Гордана, табулированные в [8].

Далее в оставшихся матричных элементах необходимо выделить зависящую от квантовых чисел M_λ , $M_{\lambda'}$ часть, используя эту формулу Вигнера—Эккарта:

$$\langle (^4f)^{N_x} S L J M | U_{lm} | (^4f)^{N_x} S' L' J' M' \rangle = \\ = \frac{C_{J M, l m}^{J' M'}}{\sqrt{2J'+1}} \langle (^4f)^{N_x} S L J || U_l || (^4f)^{N_x} S' L' J' \rangle. \quad (15)$$

Подставляя формулу (15) в (14), а затем полученное выражение—в (11), можно получить формулу для переходов между штарковскими состояниями уровней. Однако целесообразно и более практично усреднить эту формулу по штарковским состояниям, для чего надо произвести суммирование по M_λ и $M_{\lambda'}$ и полученный результат разделить на общее число штарковских состояний $(2J_\lambda+1) \cdot (2J_{\lambda'}+1)$. Выполнив эту процедуру усреднения, для дипольного момента перехода между уровнями получим следующее выражение:

$$|P_{\lambda', \lambda}|^2 = \sqrt{\frac{3 \cdot 5 \cdot 7}{8} \frac{9n_0}{\pi^2 \rho v_0^3} \left(\frac{\omega_m}{\Delta_{\lambda', \lambda}} \right)^2} \sum_{l=2,4,6} \left(\frac{ze^2 r^2 \pi}{R_0^{l+1}} \right)^2 \times \\ \times \frac{|\langle f || Y_l || f \rangle|^2}{(2J_{\lambda'}+1)(2J_\lambda+1)(2l+1)} \sum_m (V_{lm})^2 \times \\ \times |\langle (^4f)^{N_x} S_{\lambda'} L_{\lambda'} J_{\lambda'} || U_l || (^4f)^{N_x} S_\lambda L_\lambda J_\lambda \rangle|^2. \quad (16)$$

При получении формулы (16) в (11) мы провели также дополнительное усреднение по направлениям акустических волн в кристалле (по углам θ' , φ'), используя при этом условие нормировки для сферических функций:

$$\int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' Y_{l_1 m_1}^*(\theta', \varphi') Y_{l_2 m_2}(\theta', \varphi') = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}.$$

Для вычисления входящих в формулу (16) матричных элементов в атомной спектроскопии развит аппарат генеалогической схемы, пре-

ложенный Рака. Сначала выделяется зависящая от полных моментов (J) часть по формуле

$$\langle (^4f)^N \times SLJ \| U_i \| (^4f)^N \times S' L' J' \rangle = (-1)^{S+L+J+L'} \begin{Bmatrix} J L J' \\ L' S L \end{Bmatrix} \times \\ \times \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \langle (^4f)^N \times SL \| U_i \| (^4f)^N \times S' L' \rangle,$$

где $\{ : : \}$ — 6/ j -символы, значения которых табулированы в [8], значения матричных элементов $\langle (^4f)^N \times SL \| U_i \| (^4f)^N \times S' L' \rangle$ табулированы в [9]:

$$\langle (^4f)^N \times SL \| U_i \| (^4f)^N \times S' L' \rangle = N \delta_{SS'} \delta_{LL'} \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \times \\ \times \sum_{z_1 S_1 L_1} G_{z_1 S_1 L_1}^{z L S} \cdot G_{z_1 L_1 S_1}^{z' L' S'} (-1)^{L_1} \begin{Bmatrix} f L L_1 \\ L' f l \end{Bmatrix},$$

где $G_{z_1 S_1 L_1}^{z L S}$ — генеалогические коэффициенты, численные значения которых для 4 f конфигураций приведены в [9,10].

Вычисление проводим для таких систем, у которых возбужденный уровень λ' более или менее хорошо изолирован от всех остальных (в том числе и от основного). Таким путем мы устраним возможные вклады, идущие от других процессов.

1) Рассмотрим переход между уровнями $^4I_{13/2}$ и $^4I_{15/2}$ иона Er^{3+} в кристалле ИАГ. В этом случае в формуле (16) необходимо подставить следующие значения входящих в нее величин: $n_0=160$, $\rho=-4,56 \text{ г/см}^3$, $v_0=5,58 \text{ см/сек}$, $\Delta_{\lambda,\lambda'}=1,28 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$, $\omega_m=9,82 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$, $\bar{r}_{Er}^2=0,666 \text{ а.е.}$ (вычислено на основе Хартри-Фоковских радиальных волновых функций), $R_0=2,37 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $n=1,7$, $\langle f \| V_2 \| f \rangle = (7/3\pi)^{1/2}$ (здесь правила отбора допускают переходы с $l=2$), $|\langle ^4I_{13/2} \| U_2 \| ^4I_{15/2} \rangle|^2 = 0,0188$, $\sum |V_{2m}|^2 = 60,8$; тогда для эффективного дипольного момента получим $P_{\lambda,\lambda'}=2,33 \cdot 10^{-20} \text{ CGSE}$. Подставляя это значение в формулу (12), для вероятности спонтанного перехода получим $A_{\lambda,\lambda'}=2,4 \cdot 10^3 \text{ сек}^{-1}$, а для времени жизни состояния $^4I_{13/2}$ следует $\tau=1/A=4,1 \cdot 10^{-3} \text{ 1/сек}$ (эксперимент показывает значение $\approx 6,4 \cdot 10^{-3} \text{ сек}$, совпадение с расчетным значением получается при $z=0,8 \text{ а.е.}$).

Подставляя значение $P_{\lambda,\lambda'}$ в формулу (13), для неадиабатического сдвига линии получим $\Delta g_{\lambda,\lambda'}=0,016 z^2 \text{ см}^{-1}$ — характерная величина для независимого от температуры сдвига.

2) Переход $^4F_{3/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ в ИАГ: Nd^{3+} . Здесь разрешены переходы с $l=4$. Подставляя в формулу (12) значение $|\langle ^4F_{3/2} \| U_4 \| ^4I_{9/2} \rangle|^2 = 0,2397$, $\Delta_{\lambda,\lambda'}=2,17 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$, $\sum_m |V_{4m}|^2 = 380,2$, $\bar{r}_{Nd}^4=2,4 \text{ а.е.}$, для дипольного момента получим $P_{\lambda,\lambda'}=4,9 \cdot 10^{-20} \text{ CGSE}$. Для вероятности спонтанного перехода следует $A_{\lambda,\lambda'}=4,1 \cdot 10^3 \text{ сек}^{-1}$, а для времени жизни уровня $^4F_{3/2}$ получим $\tau=0,23 \cdot 10^{-3} \text{ сек}$ (экспериментальное значение $\approx 0,25 \cdot 10^{-3} \text{ сек}$, которое достигается при $z=0,95$).

Для сдвига спектральной линии, соответствующей переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$, на основе формулы (13) получим $\Delta\mathcal{E}_{\lambda,2} = 0,019z^2 \text{ см}^{-1}$.

Отметим, что для эффективного заряда ионов первой координационной сферы z ранее, при вычислении многих спектральных характеристик примесных кристаллов (ширины, сдвиги, интенсивности и т. д.) использовались значения в пределах $z = (1 \div 0,3)$ а. е. Условие электростатического равновесия для молекулы, которой являются примесный ион и его ближайшее окружение, приводит к значению $z = 1,2$ а. е.

Таким образом, приведенные здесь вычисления дают основание полагать, что для кристаллических систем, имеющих сложную структуру элементарной ячейки, существует нетрадиционный механизм снятия запрета на дипольные переходы, которые индуцируются четными компонентами потенциала ЭФВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. H. Van Vleck. J. of Phys. Chem. 41, 61 (1937).
2. B. R. Judd. Phys. Rev., 127, 750 (1962).
3. G. S. Ofelt. J. of Chem. Phys. 37, 511 (1962).
4. Ф. П. Сафарян, Г. Г. Демирханян. ЖЭТФ, 84, 2170 (1984).
5. F. P. Safarian, G. G. Demirkhanian. Solid State Commun, 56, 187 (1985).
6. R. Orbach, M. Tachiki. Phys. Rev., 158, 524 (1967).
7. Г. Г. Демирханян, Ф. П. Сафарян. Уч. записки ЕГУ. № 2, 61 (1981).
8. Д. А. Варшалович, А. К. Москалев. Квантовая теория углового момента. Л., Наука, 1975.
9. G. N. Nielson, G. F. Koster. Spectroscopic coefficients for p^n , d^n and f^n configurations. H. I. T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.
10. И. И. Соболевман. Введение в теорию атомных спектров. М., Физматгиз, 1963.

ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ԻՈՆՆԵՐՈՒՄ ՀԱՐԿԱԴՐԱԿԱՆ ԴԻՊՈԼԱՅԻՆ ԱՆՅՈՒՄՆԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐՈՆ-ՖՈՆՈՆԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԶՄԸ

Ֆ. Պ. ՍԱՖԱՐՅԱՆ, Ե. Ֆ. ՍԱՃԱՐՅԱՆ

Ցույց է տրված, որ բարդ կառուցվածք ունեցող բյուրեղներում, որոնց տարրական բջիջում խառնուրդային իոնների համար գոյություն ունեն մի քանի ոչ համարժեք դիրքեր, էլեկտրոն-ֆոնոն փոխազդեցությունը մակածում է դիպոլային անցումների խառնուրդային իոնների էլեկտրոնային մակարդակների միջև, որոնք դիպոլային մոտարկման դեպքում համաձայն զույգության կանոնի արգելված են։ Ստացված է բանաձև նման անցումների էֆեկտիվ դիպոլային մոմենտների համար և հաշված են ինչպես դրանց մեծությունը, այնպես էլ նրանց ազդեցությամբ առաջացող սպոնտան անցումների հավանականությունը, էլեկտրոնային վիճակների կյանքի տևողությունը և սպեկտրալ գծերի ոչ շերմաստիճանային շեղումները Nd^{3+} և Er^{3+} իոններով հարստացված խորիում-ալյումինային նոսքար բյուրեղում տեղի ունեցող մի քանի էլեկտրոնային անցումների համար։ Հաշվարկի արդյունքները համեմատված են փորձնական տվյալների հետ։

ELECTRON-PHONON MECHANISM OF INDUCED DIPOLE TRANSITIONS IN IMPURITY IONS IN CRYSTALS

F. P. SAFARIAN, E. F. SAFARIAN

It is shown that in complicated dielectric crystals having in unit cells a number of nonequivalent positions for impurity ions, the electron-phonon interaction induces dipole transitions between impurity electronic states of the same parity (3d, 4f states) which in dipole approximation are parity-forbidden. The formula for effective dipole moments of this transitions is obtained. The numerical values for dipole moments, spontaneous probabilities of transitions, lifetime of electronic states and nonthermal shifts of spectral lines for some of transitions in impurity centers Nd^{3+} and Er^{3+} in crystal YAG are calculated. A satisfactory agreement with experimental data is obtained.