УДК 535.341

ФИЗИКА

Ф. П. Сафарян, Г. Г. Демирханян

**Резонансная электрон-фононная передача энергии
 электронного возбуждения между ионами, максимумы
 функций спектрального распределения которых не совпадают**

(Представлено академиком АН Армянской ССР М. Л. Тер-Микаеляном 2/XI 1985)

1. Как известно, в теории резонансной передачи энергии электронного возбуждения, развитой Ферстером, Декстером и Галанциным⁽¹⁻³⁾, вероятность передачи выражается через интеграл перекрытия спектров излучения донора и поглощения акцептора. При этом считается, что донорный и акцепторный ионы связаны кулоновским взаимодействием. В⁽⁴⁻⁷⁾ показано, что к эффективной передаче может привести также электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) примесных ионов с колебаниями решетки. Причем если величина передаваемой энергии намного больше максимальной энергии фононов ($\epsilon \gg \hbar\omega_m$), то передача осуществляется путем обмена виртуальными фононами между донором и акцептором. В^(6,7) вычислена вероятность такой передачи в случае точного резонанса между электронными переходами, происходящими в доноре и акцепторе. В данной статье вычисляется вероятность передачи для случая, когда условие точного резонанса нарушено, однако имеется некоторое перекрытие спектральных функций рассматриваемых электронных переходов. Подчеркнем, что эта передача не является нерезонансной (по терминологии, принятой в литературе), поскольку, как известно, процессы нерезонансной передачи не зависят от интеграла перекрытия спектральных функций и происходят с поглощением (или испусканием) реального фонона решетки, приводя, тем самым, к совершенно иным температурным зависимостям⁽⁸⁻¹⁰⁾.

2. Допустим, что в момент времени $t=0$ возбужден первый примесный ион (донор) в электронном состоянии λ' с энергией $\epsilon_{\lambda'}$. Требуется найти вероятность того, что в момент времени $t > 0$ возбужденным окажется второй примесный ион (акцептор) в электронном состоянии μ' с энергией $\epsilon_{\mu'}$, а донорный ион перейдет в свое основное состояние λ . В результате энергия электронного возбуждения $\epsilon_{\lambda'\lambda}$ донора передается акцептору. При этом будем предполагать, что $\epsilon_{\lambda'} - \epsilon_{\mu'} = \hbar\Delta \neq 0$ ($\epsilon_{\nu\nu} = \epsilon_\nu - \epsilon_{\nu'}$, ϵ_ν — собственное значение энергии примесного иона в состоянии ν).

В представлении чисел заполнения волновая функция системы в момент времени $t=0$ имеет вид $|O\rangle = \frac{a_\mu^+ a_\lambda |n_\lambda \cdot n_\lambda n_{\mu'} \cdot n_{\mu'} v_a\rangle}{\sqrt{n_\lambda (n_\mu + 1)}}$, а в мо-

мент времени $t > 0$ $|t\rangle = \frac{a_\mu^+ a_{\lambda'} |n_\lambda \cdot n_\lambda n_{\mu'} \cdot n_{\mu'} v_a\rangle}{\sqrt{n_{\lambda'} (n_{\mu'} + 1)}}$, где $a_\nu (a_\nu^+)$ — электрон-

ные операторы уничтожения (рождения) в состоянии ν , $n_\nu(v_\nu)$ — числа заполнения электронных (фононных) состояний, $|n_\lambda, n_\mu, n_\nu, \dots, n_\nu, \dots\rangle$ — волновая функция основного состояния.

Вероятность перехода системы из состояния $|O\rangle$ в $|t\rangle$ за единицу времени равна

$$W = \frac{d}{dt} |\langle t|O\rangle|^2 = \frac{d}{dt} \frac{|\langle a_\lambda^\dagger a_\mu(t); a_\lambda^\dagger a_\mu(0)\rangle|^2}{n_\lambda n_\mu (n_\lambda + 1)(n_\mu + 1)}, \quad (1)$$

где $\langle \dots \rangle = \langle n_\lambda, n_\mu, n_\nu, \dots, n_\lambda, n_\mu, n_\nu, \dots \rangle$ означает как квантовомеханическое, так и статистическое усреднение по каноническому ансамблю Гиббса. От временной корреляционной функции $\langle a_\lambda^\dagger a_\mu(t); a_\lambda^\dagger a_\mu(0)\rangle$ можно перейти к фурье-образу соответствующей функции Грина $\langle\langle a_\lambda^\dagger a_\mu | a_\lambda^\dagger a_\mu \rangle\rangle_E$ (11), сводя тем самым вычисление вероятности (1) к вычислению функции $\langle\langle a_\lambda^\dagger a_\mu | a_\lambda^\dagger a_\mu \rangle\rangle_E$. Последнее можно осуществить, имея в основе гамильтониан ЭФВ типа гамильтониана Фрелиха, методом, описанным, например, в (7). Тогда для искомой функции Грина получим

$$\langle\langle a_\lambda^\dagger a_\mu | a_\lambda^\dagger a_\mu \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{(n_\lambda - n_\mu) A(E)}{(E + \varepsilon_{\lambda, \mu'}) (E + \varepsilon_{\lambda, \mu})}, \quad (2)$$

$$\text{где } A(E) = \sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(1)}(\lambda, \lambda) B_{\alpha}^{(1)}(\mu', \mu) \left[\frac{v_{\alpha}}{E + \varepsilon_{\lambda, \mu'} + \hbar\omega_{\alpha}} + \frac{1 + v_{\alpha}}{E + \varepsilon_{\lambda, \mu} - \hbar\omega_{\alpha}} + \frac{v_{\alpha}}{E + \varepsilon_{\lambda, \mu'} + \hbar\omega_{\alpha}} + \frac{1 + v_{\alpha}}{E + \varepsilon_{\lambda, \mu} - \hbar\omega_{\alpha}} \right], \quad (3)$$

$B_{\alpha}^{(1)}(\nu, \nu')$ — коэффициенты ЭФВ первого порядка, связывающие электронные состояния ν и ν' .

А для вероятности передачи получим следующее выражение:

$$W = 2\pi N |A(E_m)|^2 \delta(\varepsilon_{\lambda, \lambda} - \varepsilon_{\mu', \mu}), \quad (4)$$

где вместо $A(E_m)$ подставлено значение $A(E)$ (3), найденное в максимуме спектрального распределения $E_m = -\varepsilon_{\lambda, \mu'}$:

$$A(E_m) = \frac{\hbar}{\varepsilon_{\lambda, \lambda} \varepsilon_{\mu', \mu}} \sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(1)}(\lambda, \lambda) B_{\alpha}^{(1)}(\mu', \mu) [2\omega_{\alpha} + \Delta(2v_{\alpha} + 1)], \quad (5)$$

$$\text{где } N = \frac{n_{\lambda\mu} n_{\lambda'\mu'} (n_{\lambda} - n_{\mu})^2}{n_{\lambda} n_{\lambda'} (n_{\mu} + 1)(n_{\mu'} + 1)} \quad (n_{\nu, \nu'} = [\exp(\varepsilon_{\nu, \nu'}/kT) + 1]^{-1}).$$

Если считать, что электронные уровни имеют конечную ширину, то формулу (4) необходимо два раза проинтегрировать по функциям спектрального распределения $g_{\lambda, \lambda}(E)$ и $g_{\mu', \mu}(E)$, соответствующим переходам $\lambda' \rightarrow \lambda$ и $\mu \rightarrow \mu'$ (1,3). После чего, как нетрудно видеть, для вероятности W получится то же выражение (4), в котором, однако, вместо δ -функции будет стоять интеграл перекрытия $S = \int g_{\lambda, \lambda}(E) g_{\mu', \mu}(E) dE$.

Если в качестве функций $g_{\lambda, \lambda}(E)$ и $g_{\mu', \mu}(E)$ выбрать лоренцевский контур линий (с полуширинами Γ_1 и Γ_2 , соответственно), максимумы которых сдвинуты друг от друга на величину Δ , то в частном случае миграции энергии по одинаковым примесным уровням ($\Gamma_1 = \Gamma_2$) получим известное выражение (2)

$$S = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\Delta/2)^2} \quad (6)$$

Выражение (4) в отличие от случая точного резонанса ($\Delta=0$) содержит дополнительное слагаемое $\Delta(2v_x+1)$, которое вместе с выражением (6) определяет температурную зависимость вероятности передачи. Если отвлечься от сложной задачи получения правильной концентрационной зависимости вероятности передачи ^(3,6), требующей знания истинной функции фононного распределения кристалла, то для приближенной оценки относительного вклада дополнительного члена $\Delta(2v_x+1)$ в величину вероятности передачи можно воспользоваться приближением Дебая для колебаний решетки. Тогда, если учесть, что $B_x^{(n)}(v, v') \sim \frac{k}{\sqrt{\omega_x}} \sim \sqrt{\omega_x}$ (k — волновой вектор фонона), то

для величины W/W_0 (где W_0 определяется формулой (4) без учета члена $\Delta(2v_x+1)$) нетрудно получить

$$\frac{W}{W_0} = \left[1 + \frac{5\Delta}{8\omega_D} \left[1 + \frac{8T}{3T_D} D_3\left(\frac{T_D}{T}\right) \right] \right]^2, \quad (7)$$

где T_D и ω_D — температура и частота Дебая кристалла, $D_3(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3 dt}{e^t - 1}$ — функция Дебая.

Из (7) видно, что при $T \gg T_D$ величина $D_3\left(\frac{T_D}{T}\right) \sim 1$ и $\frac{W}{W_0} = \left[1 + \frac{5\Delta}{8\omega_D} \left(1 + \frac{8T}{3T_D} \right) \right]^2$, при $T \ll T_D$ величина $D_3\left(\frac{T_D}{T}\right) \sim 0$ и $\frac{W}{W_0} = \left[1 + \frac{5\Delta}{8\omega_D} \right]^2$, а при температурах $T \sim T_D$ получаем $\frac{W}{W_0} = \left[1 + 1,8 \frac{\Delta}{\omega_D} \right]^2$.

Так как для многих лазерных кристаллов $(\Delta/\omega_D) \sim 0,1 \div 1$, то можно ожидать существенного вклада второго слагаемого в (4), которое, как уже отмечалось, приводит к другой (отличной от обычно рассматриваемой в литературе) температурной зависимости вероятности резонансной передачи энергии.

Институт физических исследований
Академии наук Армянской ССР

Յ. Պ. ՍԱՅԱՐՅԱՆ, Գ. Գ. ԴԵՄԻՐԵԱՆՅԱՆ

Էլեկտրոնային գրգռման էներգիայի ռեզոնանսային էլեկտրոն-ֆոնոնային փոխանցումը խառնուրդային իոնների միջև, որոնց սպեկտրալ բաշխման ֆունկցիաների մախիմումները շեմ համընկնում

Հաշվված է բյուրեղներում խառնուրդային իոնների միջև էներգիայի փոխանցման հավանականությունը այն դեպքում, երբ դոնորի ճառագայթման և ալցիպտորի կլանման սպեկտրների մաքսիմումները շեղված են մեկը մյուսի նկատմամբ Δ մեծությամբ: Ենթադրվում է, որ էներգիայի այդպիսի փոխանցումը առաջանում է շնորհիվ իոնների միջև առաջացող էլեկտրոն-ֆոնոնա-

յին փոխազդեցության: Տեղափոխման հավանականության համար ստացված է բանաձևը, որն ունի ըստ Δ - ω փոքր պարամետրի վերլուծության տեսք: Ընդ որում այդ արտահայտության առաջին անդամը համընկնում է ճշգրիտ ռեզոնանսի դեպքում ստացված բանաձևի հետ, որը իրավունք է տալիս ենթադրելու, որ անկախ Δ շեղման մեծության, քանակական հաշվարկներում միշտ կարելի է մոտավոր հիմք ընդունել մաքուր ռեզոնանսային դեպքին համապատասխանող բանաձևը: Ինչ վերաբերվում է վերլուծության հաշորդ անդամին (որը համեմատական է Δ/ω -ին), ապա որոշ համակարգերում այն կարող է զգալիորեն փոխել ինչպես անցման հավանականության մեծությունը, այնպես էլ նրա շերմաստիճանային կախումը:

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

¹ Th. Förster, Ann. Physik, v. 2, 55 (1948); Zs. Naturf, 4a, 321 (1949); Discussion Paraday Soc., v. 27, 7 (1959). ² D. L. Dexter, J. Chem. Phys., v. 21, 836 (1953). ³ М. Д. Галачин, Тр. ФИАН СССР, т. 5, 339 (1950); т. 12, 3 (1960). ⁴ R. Orbach, M. Tachiki, Phys. Rev., v. 158, 524 (1967). ⁵ Փ. Մ. Տաֆարյան, Գ. Գ. Դեմիրխանյան, ЖЭТФ, т. 86, 2170 (1984). ⁶ F. P. Safaryun, G. G. Demirkhanyan, Sol. State Commun., v. 56, 187 (1985). ⁷ Փ. Մ. Տաֆարյան, Изв. АН Арм. ССР. Физика, т. 16, 295 (1981). ⁸ L. F. Johnson, L. G. Van Ullert, J. J. Rubln et al., Phys. Rev., v. 133, A 494 (1964). ⁹ R. Orbach, Optical properties of ions in crystals. N. Y. Interscience Publisher Inc., 1967. ¹⁰ Փ. Մ. Տաֆարյան, ДАН Арм. ССР, т. 71, 28 (1980). ¹¹ В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, Метод функции Грина в статистической механике, Ф — М., М., 1961.