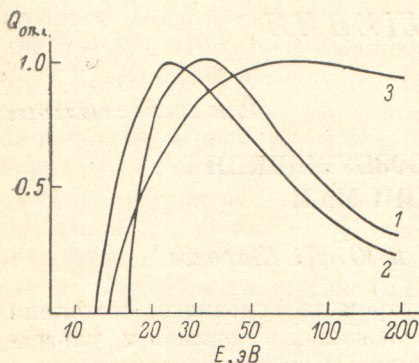


Результаты измерений представлены в таблице, где указаны переходы, которым соответствуют изучаемые спектральные линии, пороги их возбуждения, положение максимума функции возбуждения линии и эффективные сечения возбуждения из основного состояния атома.

Как видно из таблицы, измеренные линии Mn II лежат в области спектра 240–350 нм. Сечения возбуждения других спектральных линий иона марганца, лежащих в исследованном диапазоне спектра (200–630 нм), значительно меньше сечений указанных линий.



Все измеренные переходы сгруппированы вокруг резонансных уровней иона марганца z^7P^0 и уровней z^5P^0 . Мы наблюдаем каскадное заселение уровней z^7P^0 с уров-

ней z^7D и переход с этого уровня на основной уровень Mn II — a^7S_3 , а также расселение с возбужденного z^5P^0 на метастабильные a^5S_2 и a^5D .

Так как часть спектральных линий Mn II нельзя было разрешить с помощью используемой спектральной аппаратуры, в ряде случаев в таблице приведены суммарные значения сечений нескольких линий.

Для всех измеренных спектральных линий Mn II сняты функции возбуждения в диапазоне энергий налетающих электронов 0–200 эВ, которые показаны на рисунке. Необходимо отметить, что функции возбуждения спектральных линий Mn II, идущих с общего верхнего уровня, а также с уровней, расщепленных по J , идентичны, как и функции возбуждения атомных линий марганца.

Функции возбуждения спектральных линий иона марганца:

1 — переходы с уровней z^7D ; 2 — переходы с z^7P^0 ; 3 — переходы с z^5P^0 .

Для всех измеренных спектральных линий Mn II сняты функции возбуждения в диапазоне энергий налетающих электронов 0–200 эВ, которые показаны на рисунке. Необходимо отметить, что функции возбуждения спектральных линий Mn II, идущих с общего верхнего уровня, а также с уровней, расщепленных по J , идентичны, как и функции возбуждения атомных линий марганца.

Поступило в Редакцию 28 апреля 1980 г.

УДК 535.375 : 548.0

ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ ПО СПЕКТРАМ КР

И. И. Кондиленко, П. А. Коротков и Г. С. Фелинский

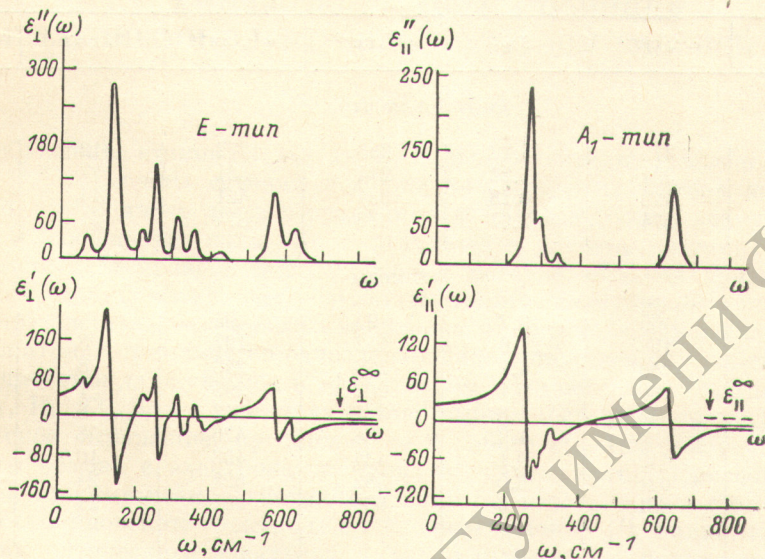
Линейная часть тензора диэлектрической проницаемости (ДП) определяет структуру и форму линий поляритонного и фононного спектра кристалла [1], а в целом вклад полярных колебаний в линейный электрооптический эффект [2, 3] и все нормальные волны в кристалле [4]. В рамках модели независимых осцилляторов [5, 6] можно представить линейную часть тензора ДП в виде

$$\epsilon_k(\omega) = \epsilon_k^\infty + \sum_{i=1}^{N_k} \frac{S_{ik}(\omega_{ik}^T)^2}{(\omega_{ik}^T)^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_{ik}}, \quad (1)$$

где S_{ik} — сила осциллятора, ω_{ik}^T — частота поперечного колебания, Γ_{ik} — константа затухания для i -го колебания с поляризацией вдоль k -й оси, ϵ_k^∞ — высокочастотная ДП, N_k — количество нормальных колебаний.

В работах [6–9] проводилось определение сил осцилляторов ДП по спектрам ИК отражения и отмечалось, что с учетом затухания для кристаллов с боль-

шим числом колебаний дисперсионный анализ (ДА) часто весьма затруднен. В [10] описан метод восстановления ИК спектра ДП по поперечно (T)—продольному (L) расщеплению частот, наблюдаемому в спектре комбинационного рассеяния (КР), и успешно применен для ДА нецентросимметричного NaBrO_3 . В предложенном методе расчетные соотношения записаны в пренебрежении затуханием, причем для ДА необходимо точное измерение интенсивностей линий КР, определение абсолютных величин и относительных знаков компонент тензоров КР и квадратичной нелинейной поляризуемости, в которой, строго говоря, необходимо учитывать зависимость от частоты [11]. Проблема неоднозначности определения комплексных нелинейных поляризуемостей на частотах собственных колебаний решетки в ряде случаев не позволяет применять метод [10].



Зависимость мнимой и действительной частей компонент тензора ДП $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ и $\varepsilon_{\parallel}(\omega)$ в области резонансного поглощения решетки в ниобате лития.

В связи с этим в настоящей работе проведено с учетом затухания и без привлечения данных по нелинейным поляризуемостям восстановление параметров формулы (1) по спектру КР. В [1] показано, что тензор ДП (1) описывает частотное положение и форму спектра КР как поперечных, так и продольных фононов. Спектр стоксовых компонент КР на продольных фононах дается функцией $L_k(\omega, S_{ik})$:

$$L_k(\omega, S_{ik}) = [n(\omega) + 1] \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon_k(\omega)} \right], \quad (2)$$

где $n(\omega) = [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]^{-1}$ — плотность фононов частоты ω . Отметим, что при отсутствии затухания в кристалле с одним полярным колебанием $L_k(\omega, S_{ik})$ имеет полюс на частоте ω_{ik}^L , когда $\varepsilon_k(\omega_{ik}^L) = 0$, причем $\omega_{ik}^L = \omega_{ik}^T \sqrt{\varepsilon_k^0/\varepsilon_k^\infty}$, что совпадает с известным соотношением ЛСТ [12]. В общем случае конечного затухания частоты продольных колебаний совпадают с максимумами функции $L_k(\omega, S_{ik})$, а форма линии КР близка к лорентцевой с полушириной, равной константе затухания Γ_{ik} .

Таким образом, искомые силы осцилляторов S_{ik} можно найти как корни системы N_k нелинейных уравнений вида

$$\Psi_i(S_{ik}) = \frac{\partial}{\partial \omega} L_k(\omega, S_{ik}) \Big|_{\omega=\omega_{ik}^L} = 0, \quad (3)$$

где $i = \overline{1, N_k}$. Явный вид системы уравнений можно получить, подставляя (1) и (2) в (3). Система (3), как видим, определяет искомые величины S_{ik} по заданным ω_{ik}^T , ω_{ik}^L и Γ_{ik} , которые весьма точно определяются по спектрам КР.

Поскольку аналитическое решение (3) удалось получить только для ограниченного числа частных случаев, то целесообразно применение численных методов. В качестве первого приближения для S_{ik} можно воспользоваться формулой [10]

$$S_{ik} = [(\omega_{ik}^L)^2 / (\omega_{ik}^T)^2 - 1] \prod_{j \neq i}^{N_k} \frac{(\omega_{jk}^L)^2 - (\omega_{ik}^T)^2}{(\omega_{jk}^T)^2 - (\omega_{ik}^T)^2}.$$

Данные наших измерений и расчета для колебаний как типа A_1 , так и типа E для ниобата лития представлены в таблице и дают хорошее соответствие полу-

Результаты ДП в ниобате лития по спектрам КР

Работа [13]			Настоящая работа			
$\omega^T, \text{см}^{-1}$	$\omega^L, \text{см}^{-1}$	S_{ik}	$\omega^T, \text{см}^{-1}$	$\omega^L, \text{см}^{-1}$	$\Gamma, \text{см}^{-1}$	S_{ik}
A-моды						
253	273	15.22	253	272	12	14.31
275	331	1.22	274	331	7	1.21
334	428	0.28	334	421	14	0.26
637	874	2.67	636	874	21	2.73
E-моды						
92	95	3.7	92	95		3.60
152	198	21.6	152	197	8	20.71
238	243	1.7	236	243	8	2.04
262	298	5.1	262	295	7	4.27
322	345	1.8	321	342	6	1.80
368	428	1.9	368	426	8	2.21
436	448	0.1	434	453	10	0.13
582	621	3.0	582	621	24	2.66
630	881	0.6	634	881	21	0.77

ченным ранее в [13]. На рисунке представлена зависимость действительной и мнимой частей $\epsilon_{\perp}(\omega)$ в области резонансного поглощения решетки. Итерационная схема решения системы (3) автоматически обрывалась при достижении среднеквадратичного отклонения вычисленных частот L -фононов от заданных на 0.1 см^{-1} , что на порядок меньше погрешности измерений частот. Численное решение (3) с указанной точностью осуществлялось путем последовательного решения i -го уравнения относительно соответствующего S_{ik} на ЭВМ ЕС-1020.

Таким образом, в нецентросимметричных кристаллах с большим количеством колебаний можно проводить ДА тензора ДП, основываясь только на измерении по спектрам КР величин: ω_{ik}^T , ω_{ik}^L и Γ_{ik} . Метод применим для кристаллов, в которых может быть измерена величина $T-L$ расщепления и полуширина линий КР.

В заключение авторы благодарят Л. Н. Луцюка за помощь в проведении расчетов на ЭВМ.

Литература

- [1] A. S. Barker, R. Loudon. Rev. Mod. Phys., 44, 18, 1972.
- [2] I. P. Kaminov, W. D. Johnston. Phys. Rev., 160, 519, 1967.
- [3] В. С. Горелик, О. Г. Золотухин, М. М. Сущинский. ФТТ, 22, 1024, 1980.
- [4] В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. «Наука», М., 1979.
- [5] М. Борн, Х. Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. ИЛ, М., 1958.
- [6] W. G. Spitzer, D. Kleinman, D. Walsh. Phys. Rev., 113, 127, 1959.
- [7] М. В. Белоусов, Д. Е. Погарев, А. А. Шульгин. ФТТ, 11, 2697, 1969; 12, 991, 1970.
- [8] L. Merten, G. Lamprecht. Phys. Stat. Sol., 39, 573, 1970.
- [9] М. В. Белоусов, Д. Е. Погарев. Опт. и спектр., 38, 1018, 1975.
- [10] М. В. Белоусов. ФТТ, 15, 1206, 1973.

- 11] И. И. Кондиленко, П. А. Коротков, Г. С. Фелинский. УФЖ, 25, 855, 1744, 1980.
 12] R. H. Luddane, R. G. Sachs, E. Teller. Phys. Rev., 59, 673, 1941.
 13] W. D. Johnston. Phys. Rev., 31, 3494, 1970.

Поступило в Редакцию 12 сентября 1980 г.

УДК 539.186.2 : 546.621

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ АТОМОВ ПОДГРУППЫ АЛЮМИНИЯ МЕДЛЕННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ МЕТОДОМ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Ю. И. Рябык

Возбуждение атомов Al, Ga, In и Tl экспериментально исследовалось в ряде работ [1-5]. Расчеты сечений возбуждения для этих атомов до настоящего времени проводились лишь в различных вариантах теории возмущений. В настоящем сообщении излагаются результаты расчета сечений возбуждения резонансных 2S -уровней данных атомов методом сильной связи при малых энергиях столкновения, где результаты теории возмущений ненадежны. Рассмотрены энергии налетающего электрона от порога возбуждения до 1 Ryd.

Для атомов принимается одноэлектронное приближение. Оптический p -электрон считается движущимся в эффективном поле остова ns^2S , где $n=3-6$ для Al, Ga, In, Tl. Для потенциала остова выбиралось двухпараметрическое аналитическое выражение, предложенное в работе [6]. Поляризуемость остова и эффекты обмена с электронами остова не учитываются. Пренебрегаем также релятивистскими взаимодействиями. Таким образом, задача становится аналогичной столкновению электрона с щелочным атомом [7]. Радиальные волновые функции оптического электрона в потенциале остова находились численным интегрированием как собственные функции уравнения Шредингера. Параметры потенциала выбирались так, чтобы энергия основного состояния совпала с экспериментальным значением центра тяжести основного дублета $ns^2np\ {}^2P_{1/2,3/2}$. В качестве второго условия применялось соотношение между параметрами, принятое в [6].

Пренебрегая магнитным взаимодействием налетающего электрона с атомом, можно показать, что в случае, когда конечным состоянием является синглетный 2S -уровень, сечение возбуждения его с отдельного подуровня основного состояния не зависит от полного момента начального подуровня. Поэтому сечение возбуждения 2S -уровня, усредненное по подуровням начального состояния, отличается от сечения перехода между соответствующими нерасщепленными термами лишь множителем, зависящим от тонкой структуры и фактической заселенности начального состояния. Для Al, Ga и In этот множитель практически равен единице при всех рассмотренных энергиях. Поэтому сечения возбуждения для Al, Ga и In вычислялись по формулам перехода между термами, а в качестве энергий атомных состояний в методе сильной связи брались средние энергии термов. В атоме Tl в условиях эксперимента [1] метастабильный уровень основного дублета $6^2P_{3/2}$ оказывается практически не заселенным. Благодаря отмеченной выше независимости сечения возбуждения 2S -уровня от полного момента компоненты тонкой структуры начального уровня, для Tl применялись те же формулы для сечений, но при решении уравнений сильной связи в качестве энергии основного состояния бралась энергия заселенной компоненты $6^2P_{1/2}$.

В расчете оказалось возможным учесть сильную связь $ns^2np\ {}^2P-(n+1)s^2S-(n+1)p\ {}^2P$ -состояний с учетом обмена. Результаты расчетов и экспериментальные данные приведены на рисунке. На рисунке также указаны сечения в приближениях Борна и $np^2P-(n+1)s^2S$ -связи. Сечения возбуждения $(n+1)^2S$ -