

По формуле (6) нами рассчитывалось полное сечение ДФИ атома бериллия как функции превышения энергии налетающего фотона над потенциалом двукратной ионизации $\epsilon = \omega - J$. Интегрирование в (6) проводилось численно на ЭВМ. Результаты расчетов представлены на рис. 2 (кривая 1). Для сравнения на этом же рисунке мы привели результаты расчетов, выполненных с помощью многочастичной теории возмущений [11]. Как видно из рисунка, согласие результатов хорошее. Отметим, что по форме полученная нами кривая для δ^{++} атома бериллия напоминает кривую для δ^{++} атома гелия, полученную тем же методом в [8].

В заключение автор выражает глубокую признательность Л. Н. Лабзовскому за полезное обсуждение и советы, которые были учтены при написании статьи.

Литература

- [1] T. A. Carlson. Phys. Rev., 156, 142, 1967.
- [2] M. J. van der Wiel, G. Wiebes. Physica, 77, 411, 1971.
- [3] R. L. Brown. Phys. Rev., A1, 586, 1970.
- [4] F. W. Byron, C. J. Jochain. Phys. Rev., 164, 1, 1967.
- [5] F. W. Byron, C. J. Jochain. Phys. Rev., A24, 11, 1967.
- [6] М. С. Юрьев. Опт. и спектр., 38, 9, 1975.
- [7] M. Ya. Amusia et al. J. Phys. B, 8, 1248, 1975.
- [8] С. М. Варнавских, Л. Н. Лабзовский. Опт. и спектр., 47, 1, 1979.
- [9] T. Aberg. Phys. Rev., A2, 1726, 1970.
- [10] S. L. Carter, H. P. Kelly. J. Phys. B, 9, 1887, 1976.
- [11] P. Winkler. J. Phys. B, 10, L693, 1977.
- [12] T. N. Chang, R. T. Poe. Phys. Rev., A12, 1432, 1975.
- [13] S. L. Carter, H. P. Kelly. J. Phys. B, 9, L565, 1976.
- [14] R. B. Cairns et al. Phys. Rev., 183, 52, 1969.
- [15] М. Г. Веселов. Опт. и спектр., 10, 693, 1961.
- [16] И. Б. Берсукер. Опт. и спектр., 3, 2, 1957.
- [17] И. Л. Бейгман. Опт. и спектр., 28, 3, 1970.
- [18] R. W. Steart. J. Chem. Soc., 70, 524, 1974.

Поступило в Редакцию 3 октября 1979 г.

УДК 621.373 : 535 (206.1)

О ФОРМЕ ТЕНЗОРА ГЕНЕРАЦИИ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ НЕКОТОРЫМИ КРИСТАЛЛАМИ В НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЕ

Л. Г. Жидков

В последнее время появился ряд экспериментальных работ, отмечающих нарушения в форме тензора генерации второй гармоники, соответствующего кристаллу в несоизмерной фазе [1, 2]. В работе [1] обнаружена новая компонента тензора рассеяния d_{23} , появляющаяся в несоизмерной фазе кристалла $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$, в работе [2] указывается на наличие лишних компонент d_{22} , d_{23} и других в сульфате аммония.

В задачу работы входит выяснить причины появления этих добавочных компонент.

В кристалле того же семейства K_2SeO_4 [4] модуляцию в несоизмерной фазе связывают с модой $\Gamma_3(q_6)$. По приведенным там экспериментальным данным мода $\Gamma_3(q)$ также сильно понижается по частоте по мере приближения к температуре перехода из несоизмерной фазы в сегнетофазу. Поэтому можно предположить (и этому по крайней мере не противоречат данные работ [1, 2]), что за модуляцию ответственна мода $\Gamma_3(q_6) + \Gamma_2(q)$. Исходя из такого предположения, можно получить вид тензора генерации второй гармоники, соответствующий результатам работ [1, 2]. Качественно генерацию света при этом можно представить как рассеяние света на двух-

частичном возбуждении, одно из которых связано с модуляцией, другое — с деформацией электронных состояний, вызванной падающим светом. На языке элементарных возбуждений последнему можно поставить в соответствие возбуждение, преобразующееся как компоненты тензора второго ранга [3].

Интенсивность генерации второй гармоники определяется вкладом третьего порядка ряда теории возмущений по взаимодействию света с веществом H_{exR} , находящимся в исходном состоянии $|i\rangle$

$$I \sim \left| \sum \frac{\langle i | H_{exR} | l \rangle \langle l | H_{exR} | m \rangle \langle m | H_{exR} | i \rangle}{(2\omega_1 - \omega_l)(\omega_1 - \omega_m)} \right|^2, \quad (1)$$

где ω_1 — частота падающего света, ω_l — энергия промежуточного состояния l . Матричный элемент с точностью до учета линейных по вектор-потенциалу падающего излучения членов имеет вид

$$\langle m | H_{exR} | i \rangle = A_0 \langle m | \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} | i \rangle. \quad (2)$$

Здесь A_0 — амплитуда поля излучения, \mathbf{s} — единичный вектор поляризации излучения, \mathbf{p} — импульс электрона. Ввиду выражений (1) и (2) правила отбора генерации второй гармоники определяются состояниями невозмущенного кристалла. Вклад произведения матричных элементов в выражении (1) не равен нулю в случае, если оно преобразуется как куб векторного представления. Форма же тензора генерации определяется коэффициентами Клебша—Гордона $U_{\alpha\beta\gamma, \Gamma_\mu}$, связывающими моду Γ_μ , на которой происходит рассеяние, с произведением компонент представлений, активных в рассеянии [5]. В случае генерации второй гармоники мода, на которой происходит рассеяние, преобразуется по представлению, базис которого образован компонентами тензора. Поэтому в данном случае форма тензора генерации имеет вид

$$\langle i | R_{\alpha\beta\gamma} | i \rangle \sim U_{\alpha\beta\gamma, \Gamma_\mu}. \quad (3)$$

Точечная группа кристаллов K_2SeO_4 , $(NH_4)_2BeF_4$, $(NH_4)_2SO_4$ в несоизмерной фазе $mm2$ [1, 2, 4]. Пользуясь выражением (3) и таблицами коэффициентов Клебша—Гордона для точечных групп [6], легко убедиться, что активными в генерации света модами для исследуемых кристаллов являются $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$. Из этих четырех типов Γ_3 имеет базис, преобразующийся как xy компонента тензора. Генерация второй гармоники в несоизмерной фазе поэтому происходит как рассеяние света на моде деформации электронных состояний типа Γ_3 . Применение выражения (3) с использованием таблиц [6] дает ненулевые элементы тензора генерации второй гармоники в несоизмерной фазе $d_{31}, d_{32}, d_{33}, d_{24}, d_{15}$ в согласии с известным видом пьезоэлектрического тензора [7].

В несоизмерной фазе кристалл будем считать промодулированным модой $\Gamma_3(q_6) + \Gamma_2(q)$. Тогда генерация второй гармоники произойдет на возбуждении, преобразующемся как прямое произведение $\Gamma_3 \times (\Gamma_3 + \Gamma_2) = \Gamma_1 + \Gamma_4$. Закон сохранения импульса при этом легко выполняется при выполнении условий синхронизма и мы далее опустим волновые вектора. Используя выражение (3), имеем следующие ненулевые элементы тензора генерации второй гармоники: $d_{31}, d_{32}, d_{33}, d_{24}, d_{15}, d_{22}, d_{23}, d_{16}$. Среди этих элементов «запрещенными» являются d_{22}, d_{23} и d_{16} . Элементы d_{22} и d_{23} наблюдались в работах [1, 2]. Указаний на то, что наблюдался элемент d_{16} , нами не обнаружено. Соответствующие измерения могли бы пролить дополнительный свет на природу появления запрещенных компонент в тензоре генерации второй гармоники, а также на тип модуляции несоизмерной фазы.

Проведенное рассмотрение дает основание полагать, что в несоизмерной фазе кристаллы K_2SeO_4 и $(NH_4)_2BeF_4$ модулированы модой типа $\Gamma_3(q_6) + \Gamma_2(q)$. То же самое можно утверждать и для $(NH_4)SO_4$. Однако это рассмотрение без проведения соответствующего эксперимента нельзя рас-

смагивать как доказательство наличия несоразмерной фазы у последнего кристалла. В результате имеем объяснение появления «запрещенных» компонент в тензоре генерации второй гармоники для рассмотренных кристаллов как проявление модуляции модой типа $\Gamma_3 + \Gamma_2$.

В заключение приношу благодарности за стимулирующие работу обсуждения И. С. Кабанову и В. Ф. Шабанову.

Литература

- [1] К. С. Александров, А. Н. Втюрин, В. Ф. Шабанов. Письма ЖЭТФ, 28, 153, 1978.
- [2] И. С. Кабанов. Препринт Инст. физики СО АН СССР, ИФСО-77Ф, Красноярск, 1978.
- [3] В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. «Наука», М., 1965.
- [4] M. Iizumi, J. D. Axe, G. Shirane. Phys. Rev., B15, 4392, 1977.
- [5] J. L. Birman, R. Berenson. Phys. Rev., B9, 4512, 1974.
- [6] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, H. Statz. Properties of thirty-two point groups, M. I. T. Press, Cambridge, 1963.
- [7] Дж. Най. Физические свойства кристаллов. «Мир», М., 1967.

Поступило в Редакцию 29 ноября 1979 г.

УДК 535.36 : 532.77

РАССЕЯНИЕ СВЕТА РАСТВОРАМИ ТРЕТИЧНОГО БУТАНОЛА В ВОДЕ, ВЫЗВАННОЕ МАЛОЙ ДОБАВКОЙ ТРУДНОРАСТВОРИМОЙ ПРИМЕСИ

Э. П. Куликова, М. Ф. Вукс и Л. В. Шурупова

Изучение критического состояния жидкость—газ с помощью примесных парамагнитных частиц [1] показало, что вблизи критической точки растворимость примесных молекул резко падает в газовой фазе. Нами было проведено аналогичное исследование вблизи критической точки расслоения раствора в системах ацетонитрил—вода и ацетонитрил—тяжелая вода с малой примесью антрацена [2]. Наблюдение показало, что в момент расслоения раствора примесь антрацена высаживается на границе двух фаз в виде мельчайших крупинок. Из-за малой разницы показателей преломления воды и ацетонитрила граница расселения в этих системах трудно различима. Примесь антрацена делает границу отчетливой и с ее помощью можно было более точно установить температуру расслоения.

Проведенные ранее исследования рассеяния света в водных растворах спиртов и некоторых других неэлектролитов привели к обнаружению узких добавочных максимумов рассеяния света в области низких концентраций неэлектролита, которые были объяснены структурными фазовыми переходами [3]. В системе третичный бутанол—вода этот максимум расположен на концентрации 0.03 мол. доли спирта. В данной работе мы хотели выяснить, как влияет добавка труднорастворимой примеси антрацена на интенсивность рассеяния света в водных растворах трет.-бутанола.

Растворимость антрацена в трет.-бутаноле равна 3.5 г/л, а в воде он почти не растворяется. Были приготовлены три раствора с содержанием 0.035, 0.0035 и 0.0007 г/л антрацена в спирте. В последнем случае примесь антрацена была в 5000 раз ниже предела растворимости. Эти растворы затем смешивались с водой при различных концентрациях. Исследование рассеяния света ($\lambda = 546$ нм) показало, что примесь антрацена не оказывает никакого влияния на интенсивность рассеяния света, за исключением узкой области вблизи концентрации 0.03 мол. доли спирта, т. е. в области