

- [5] Г. Д. Бир, Г. Е. Пикус, Л. Г. Суслина, Д. Л. Федоров, Е. Б. Шадрин. ФТТ, 13, 3551, 1971.  
 [6] A. J. Ryskin, L. G. Suslina, G. J. Khilko, E. B. Shadrin. Phys. Stat. Sol. (b), 49, 875, 1972.

Поступило в Редакцию 1 июля 1981 г.

УДК 539.194.01

## ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ С ДВУХЪЯМНЫМИ АДИАБАТИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

С. А. Кулагин и И. С. Осадько

Оптические спектры многоатомных органических молекул, растворенных в *n*-парафинах, часто имеют мультиплетную структуру. Обсуждая природу мультиплета, Шпольский предположил [1], что линии мультиплета отвечают пространственно разделенным примесным центрам. Вскоре это предположение было подтверждено в экспериментах [2]. Позднее было обнаружено существование обратимых изменений в линиях мультиплета под действием лазерного света [3], которые противоречили гипотезе Шпольского [1]. Поэтому было предположено, что некоторые линии в таких мультиплетах могут отвечать примесным центрам с двухъямными адиабатическими потенциалами [4]. В настоящей работе на основе численных расчетов обсуждаются отличия дублетных спектров двухъямной природы от дублетов, порожденных пространственно разделенными центрами.

Основная задача — учесть влияние на оптические спектры возможности перехода примесного центра из одной ямы в другую. Как известно [5], волновые функции  $\psi_i(x)$  стационарных состояний, соответствующих подбарьерным уровням  $\varepsilon_i$ , локализованы либо в одной, либо в другой яме асимметричного двухъямного потенциала. Переходы между состояниями, локализованными в одной яме, являются внутриямными, а между состояниями, локализованными в разных ямах — межъямными. Причиной переходов является взаимодействие  $\lambda(x, \varphi)$  двухъямной моды  $x$  с фононами  $\varphi$ .

В линейном по  $\varphi$  приближении матричные элементы этого взаимодействия на функциях  $\psi_i(x)$  имеют вид

$$\Lambda_{i,i'}(\varphi) = u\varphi \int \psi_{i'}(x) \lambda(x) \psi_i(x) dx = u\varphi \lambda_{i,i'}, \quad (1)$$

где  $u$  — единичный вектор градиента взаимодействия. Вероятность  $\Gamma_{i,i'}$  перехода между уровнями  $\varepsilon_i$  и  $\varepsilon_{i'}$  двухъямной моды в дебаевском приближении при  $|\varepsilon_i - \varepsilon_{i'}| < \hbar\nu_D$  выглядит так

$$\Gamma_{i,i'} = \lambda_{i,i'}^2 \frac{3\pi |\nu|^3}{\nu_D^4} [(n(\nu) + 1)\Theta(\nu) + n(-\nu)\Theta(-\nu)]_{\hbar\nu = \varepsilon_i - \varepsilon_{i'}}, \quad (2)$$

где  $\Theta(\nu)$  — ступенчатая функция Хевисайда,  $\nu_D$  — дебаевская частота,  $n(\nu) = [\exp(\hbar\nu/kT) - 1]^{-1}$ .

Распределение интенсивности в спектре люминесценции описывается формулой

$$I(\omega) = \sum_i N_i^e(T) \sum_{i'} |\langle \psi_i^0 | \psi_{i'}^e \rangle|^2 \delta(\varepsilon_i^e - \varepsilon_i^0 - \hbar\omega), \quad (3)$$

где индекс 0 отмечает величины основного электронного состояния, а  $e$  — возбужденного. Равновесные населенности  $N_i^e(T)$  при стационарном возбуждении  $J$  можно найти из системы уравнений

$$\sum_{i'} (-\gamma_{i,i'} + \Gamma_{i,i'}) N_i^e + J_i = 0, \quad (4)$$

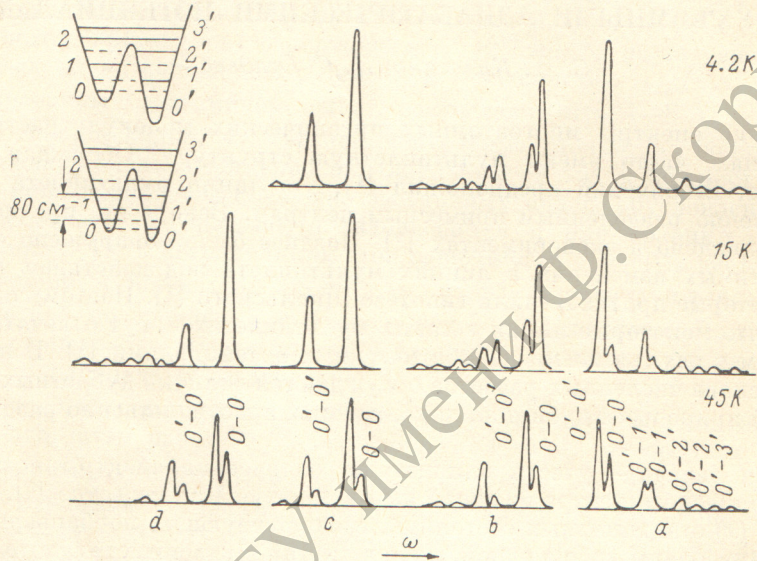


где  $\gamma$  — вероятность излучательного распада электронно-возбужденного состояния,  $J_i$  — вероятность возбуждения светом уровня  $\varepsilon_i$ ,  $\Gamma_{i' i} = - \sum_{i'' (\neq i)} \Gamma_{i' i''}$ . Спектр поглощения получается из (3) заменой индекса  $e$  на 0 и наоборот. Населенности  $N_i^g(T)$  — Больцмановские.

Волновые функции  $\psi_i^g(x)$  двухъямной моды ( $g=0, e$ ) находились из уравнения Шредингера с потенциалом

$$V^g(x) = -V^g(\cos x - \xi^g \cos 2x + \chi^g \sin x), \quad (5)$$

где  $x$  — безразмерная координата, характеризующая положение или ориентацию примесной молекулы относительно окружения.



Зависимость спектров поглощения и люминесценции от температуры и длины волны возбуждающего света.

$a$  — спектр поглощения;  $b, c, d$  — спектры люминесценции при возбуждении в линию  $0'-2$  ( $b$ ), в  $0'-0'$  ( $c$ ), в  $0-0$  ( $d$ ).  $V^0 = V^e = 1200 \text{ см}^{-1}$ ,  $\xi^0 = \xi^e = 0.37$ ,  $\chi^0 = 0.005$ ,  $\chi^e = 0.01$ .

Используя  $\lambda(x) = \lambda_0 \sin x$ , мы рассчитали по формуле (2) вероятности  $\Gamma_{i' i}$  внутриямных и межъямных переходов, причем константа  $\lambda_0$  была выбрана такой, чтобы вероятность внутриямных переходов была  $10^{12} \text{ с}^{-1}$  (замена  $\sin x$  на  $\cos x$  или  $\cos 2x$  не приводит к принципиально отличным результатам). С этими вероятностями и с  $\gamma = 10^9 \text{ с}^{-1}$  были найдены из системы (4) населенности  $N_i^g(T)$  и потом по формуле (3) рассчитан спектр люминесценции, а также спектр поглощения. Спектры и адиабатические потенциалы примесного центра изображены на рисунке. Линии, отвечающие электронно-колебательным переходам искусственно уширены, что передает неоднородное уширение реальных спектров. Влиянием фоннных крыльев на спектры мы пренебрегли, так как в реальных квазилинейчатых спектрах фоннные крылья действительно малы [6].

Рассмотрим сначала спектры при 15 К. При этой температуре вероятность межъямных переходов в рассматриваемой двухъямной системе меньше, чем излучательная вероятность  $\gamma$ . Поэтому две ямы спектроскопически проявляются как два пространственно разделенных центра. Действительно, в этом случае при возбуждении в отдельные компоненты дублета наблюдается исчезновение дублетности в спектре люминесценции ( $c, d$ ), как в [2].<sup>1</sup>

При повышении температуры ( $T=45 \text{ К}$ ) вероятность межъямных переходов превосходит  $\gamma$ , и поэтому исчезает зависимость спектра люминесценции от длины волны возбуждения. При понижении температуры ( $T=4.2 \text{ К}$ ) населен-

<sup>1</sup> Если линии сопровождаются фоннными крыльями, причем фоннное крыло, сопровождающее длинноволновую линию, перекрывается с коротковолновой линией, то дублетность может сохраниться [7].



ность уровня 0 нижнего потенциала мала, и поэтому исчезает дублетность спектра поглощения.

Таким образом, дублетные спектры двухъямной природы имеют две отличительные особенности: 1) при повышении температуры исчезает зависимость спектра люминесценции от длины волны возбуждения; 2) при понижении температуры исчезает дублетность спектра поглощения.

#### Литература

- [1] Э. В. Шпольский. Усп. физ. наук, 71, 215, 1960.
- [2] Г. М. Свищев. Изв. АН СССР, сер. физ., 27, 696, 1963.
- [3] О. Н. Коротаев, Р. И. Персонов. Опт. и спектр., 32, 900, 1972.
- [4] I. S. Osad'ko. Phys. Stat. Sol. (b), 82, K107, 1977.
- [5] M. C. Flanigan, J. R. de la Vega. J. Chem. Phys., 61, 1882, 1974.
- [6] И. С. Осадько, Е. И. Альшиц, Р. И. Персонов. ФТТ, 16, 1974, 1974.
- [7] К. К. Ребане, П. Саари, Т. Тамм. Изв. АН ЭССР, 19, 251, 1970.

Поступило в Редакцию 23 июля 1981 г.

УДК 539.184.01

### СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНЫХ ТРЕХУРОВНЕВЫХ РЕЗОНАНСОВ ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ СООТНОШЕНИЯХ ОДНОРОДНОЙ И НЕОДНОРОДНОЙ ШИРИН ПЕРЕХОДОВ

О. Г. Быкова, В. В. Лебедева, Н. Г. Быкова и А. В. Петухов

Физические основы образования структуры на доплеровски уширенном контуре перехода в присутствии сильного монохроматического поля на смежном переходе в общих чертах известны [1, 2]. Однако подробный анализ структуры проведен только в приближении  $k\bar{v} \gg \Gamma$  (доплеровский предел).

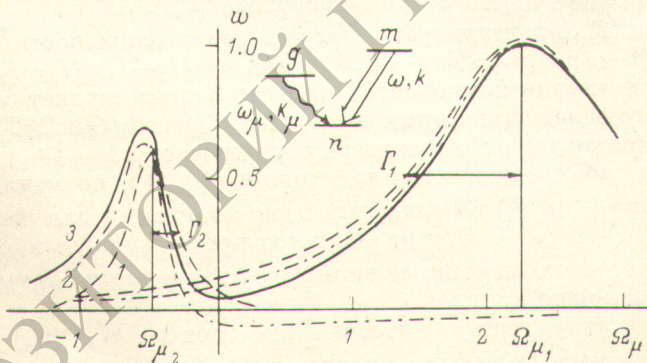


Рис. 1. Групповой спектр  $w_p(\Omega_\mu)$  (1), его компоненты (2) и лорентцевы контуры (3), соответствующие компонентам спектра. Для данного примера  $G=1$ ,  $kv=2$ .

При этом  $\Gamma_1=0.87$ ,  $\Gamma_2=0.20$ ,  $\Omega_{\mu 1}=2.27$ ,  $\Omega_{\mu 2}=-0.48$ ,  $\alpha=-0.76$ ,  $\beta=-0.15$ ,  $I_1/I_2=7.3$ .

В этом же приближении в предельных случаях сильного [3] и слабого [4] насыщения получены аналитические выражения для формы спектра. В данной работе выполнен корректный учет влияния доплеровской ширины перехода на характер нелинейных резонансов. Объектом рассмотрения служит трехуровневая схема изогнутого типа (рис. 1), однако свойственные ей закономерности имеют место и для других трехуровневых схем. Форма спектра  $W_{gn}(\Omega_\mu)$  пробного поля дается выражением [5]

$$W_{gn}(\Omega_\mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi\bar{v}}} \int_{-\infty}^{\infty} w_p(G, \Gamma_{if}, \Gamma_i, N_i, \Omega, \Omega_\mu, v) \exp[-(v/\bar{v})^2] dv, \quad (1)$$