

УДК 535.341

## НЕАДИАБАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ МНОГОФОНОННЫХ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПРИМЕСНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Ф. П. Сафарян, С. А. Агабян, Н. А. Григорян

Проводится вычисление вероятностей многофононных безызлучательных переходов (МБП), происходящих в примесных центрах диэлектрических кристаллов. При этом учитывается вклад линейного по фононным операторам члена гамильтониана электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ). Показано, что этот вклад является наиболее общим, так как на его основе в частном случае получается известная формула адиабатического приближения. Для проведения количественных оценок предлагается приближенная формула, которая позволяет при конкретных вычислениях для примесных РЗ ионов отвлечься от штарковской структуры мультиплетов и найти вероятности МБП непосредственно между уровнями. Затем полученная формула используется для вычисления вероятностей МБП, происходящих в нескольких каналах примесных ионов  $\text{Nd}^{3+}$  и  $\text{Er}^{3+}$  в кристалле иттрий-алюминиевого граната (ИАГ).

Изучение процессов МБП имеет важное значение. За счет этих процессов устанавливаются конечные времена жизни для метастабильных примесных электронных состояний. Они заселяют также верхние лазерные состояния и одновременно рассеяют нижние состояния, способствуя таким образом развитию процесса стимулированного лазерного излучения. Изучение процессов МБП представляет также определенный теоретический интерес.

Неполный обзор основных работ по теории МБП примесных диэлектрических кристаллов приведен в недавно опубликованной работе [1], где подробно рассматривается так называемая «адиабатическая» теория МБП, основанная на применении линейного по фононным операторам члена эффективного гамильтониана адиабатического приближения (АП) в качестве оператора возмущения при вычислении вероятности МБП (см. также [2, 3] и указанные там работы). Однако, как показано в [1], применение этой теории для примесных РЗ ионов, являющихся существенно неадиабатическими системами, привели к неверным результатам [2-4], что заставило авторов работ [5-7] применить другой подход, основанный на использовании  $n$ -фононного члена гамильтониана электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) в качестве оператора возмущения. Отметим, что этот подход существенно приблизил расчетные и экспериментальные значения вероятности МБП. Однако учет только последнего ( $n$ -фононного) члена гамильтониана ЭФВ и пренебрежение всеми предыдущими членами (до линейного включительно) теоретически ничем не обосновано. Вклад линейного по фононам члена ЭФ гамильтониана впервые был учтен в [8] для вычисления вероятности МБП, происходящих в рубине. О преобладающей роли этого вклада указано в [9]. В [10, 11] на основе учета этого вклада (и  $n$ -фононного вклада также) проведены количественные вычисления вероятностей МБП, происходящих в кристалле ИАГ— $\text{Nd}^{3+}$ . В настоящей статье мы покажем, что упомянутый существенно неадиабатический вклад линейного по фононным операторам члена ЭФ гамильтониана является наиболее общим: на его основе в частном случае АП мы получим известную формулу для вероятности МБП,

рассмотренную в [1-4]. Кроме того, для проведения сравнительно простых количественных вычислений применительно к примесным РЗ ионам мы преобразуем эту формулу к виду, позволяющему отвлечься от штарковской структуры мультиплетов и вычислить вероятности МБП непосредственно между электронными уровнями. Количественные вычисления проведены для нескольких каналов БП в ионах  $Nd^{3+}$  и  $Er^{3+}$ , находящихся в кристалле ИАГ, в виде примесей.

## 1. Вероятность многофононных БП

Вероятность МБП можно найти в рамках общей теории электрон-фононной релаксации энергии электронного возбуждения. В [10] приведены подобные вычисления, которые для вероятности МБП привели к золотому правилу Ферми, имеющему вид

$$W_{\lambda\mu}^{(n)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_n} |B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu)|^2 \prod_{i=1}^n (1 + \nu_{\alpha_i}) \delta \left( \Delta_{\lambda\mu} - \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha_i} \right), \quad (1)$$

где  $\Delta_{\lambda\mu} = (\epsilon_\lambda - \epsilon_\mu) / \hbar = \Delta \epsilon_{\lambda\mu} / \hbar$  ( $\epsilon_\lambda$  — энергия электрона в одночастичном состоянии  $\lambda$ ). Формула (1) соответствует МБП из верхнего примесного электронного уровня  $\lambda$  на нижний примесный уровень  $\mu$ . В этом процессе МБП участвуют  $n$ -фононы решетки типа  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  ( $\nu_\alpha = [\exp(\hbar \omega_\alpha / kT) - 1]^{-1}$  — число заполнения фононов). Коэффициенты ЭФВ  $B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu)$  имеют довольно сложную структуру. Если в гамильтониане ЭФВ сохранить только линейные (пропорциональные коэффициентам  $B_{\alpha_i}^{(1)}(\nu, \nu')$ ) члены, то для коэффициентов  $B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu)$  получим следующее выражение

$$B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu) = \frac{1}{\hbar^{n-1}} \sum_{\{\nu_i\}} \frac{\prod_{i=0}^{n-1} B_{\alpha_i+1}^{(1)\nu_i}(\nu_i, \nu_{i+1})}{\prod_{i=1}^n \left( \Delta_{\nu_i, \lambda} + \sum_{j=1}^i \omega_{\alpha_j} \right)} + N, \quad (2)$$

в котором подразумевается, что  $\nu_0 = \lambda$ ,  $\nu_n = \mu$ ,  $\{\nu_i\} = \nu_1, \dots, \nu_{n-1}$  — набор промежуточных состояний, по которым идет суммирование в (2),  $N$  — сумма членов, которые получаются от явно выписанного перестановкой индексов ( $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ ) (количество всех слагаемых в (2) равно, очевидно,  $n!$ ).

Как видно, формула (2) имеет довольно сложную структуру, поэтому вычисление вероятности, проводимое на ее основе, представляет значительную трудность, особенно в случае, когда в процессе МБП участвуют большое число фононов.

Как показали проводимые в [10-12] вычисления, в процессах безызлучательной дезактивации энергии электронного возбуждения примесных ионов (при  $n \leq 3$ ) основными являются вклады линейного члена ЭФ гамильтониана. Это дает основание предполагать, что в случае МБП при  $n > 3$  этот вклад также является определяющим.

Допустим, что из фигурирующих в (2)  $n$ -фононных переходов  $k$  переходы происходят между штарковскими состояниями верхнего мультиплета (промежуточные состояния этого мультиплета обозначены буквами  $\nu_i = \lambda_i$ ), один переход перекрывает энергетическую щель  $\Delta_{\lambda\mu}$ , а оставшиеся  $(n-1-k)$  переходы происходят между штарковскими состояниями нижнего мультиплета ( $\nu_i = \mu_i$ ). Тогда, учитывая, что  $\Delta_{\mu_i, \lambda} = -\Delta_{\lambda\mu} - \Delta_{\mu\mu_i}$ , а также закон сохранения энергии, фигурирующий в формуле (1) в виде  $\delta$ -функции  $\left( \Delta_{\lambda\mu} = \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha_i} \right)$ , коэффициенты (2) можно представить в виде

$$B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu) = \frac{(-1)^{n-1}}{\hbar^{n-1}} \sum_{\mu_1 \dots \mu_{n-1}} B_{\alpha_1}^{(1)}(\lambda, \mu_1) \prod_{i=1}^{n-1} \frac{B_{\alpha_i+1}^{(1)}(\mu_i, \mu_{i+1})}{\Delta_{\mu\mu_i} + \sum_{j=i+1}^n \omega_{\alpha_j}} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\hbar^{n-1}} \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^{n-1-k} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_k} \prod_{i=1}^k \frac{B_{\alpha_i}^{(1)}(i, i-1, \lambda_i)}{\Delta_{\lambda_i \lambda} + \sum_{j=1}^i \omega_{\alpha_j}} \sum_{\mu_{k+1} \dots \mu_{n-1}} B_{\alpha_j}^{(1)}(k, k+1) \times \\
& \times \prod_{i=k+1}^{n-1} \frac{B_{\alpha_{i+1}}^{(1)}(i, i, \mu_{i+1})}{\Delta_{\mu_i \mu} + \sum_{j=i+1}^n \omega_{\alpha_j}} + N.
\end{aligned} \quad (3)$$

Формула (1) (после подстановки в нее выражения (3) для коэффициента ЭФВ) является наиболее общей для вычисления вероятностей МБП, происходящих в примесных центрах. Формулу для адиабатического приближения, рассмотренную в [1-4], можно получить из (3), записывая ее для случая двух изолированных друг от друга невырожденных уровней. Очевидно, в этом случае в системе выполняется условие адиабатического приближения ( $|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_\mu| \gg \hbar \omega_\alpha$ ).<sup>1</sup> Итак, если в (3) выделить диагональные компоненты и воспользоваться тождеством [8]

$$\sum_{\substack{i, j, \dots, m \\ i \neq j \neq \dots \neq m}} [\omega_i (\omega_i + \omega_j) \dots (\omega_i + \omega_j + \dots + \omega_m)]^{-1} = (\omega_i \omega_j \dots \omega_m)^{-1},$$

то получим

$$B_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{*(n)}(\lambda, \mu) = \frac{1}{\hbar^{n-1}} \sum_{j=1}^n B_{\alpha_j}^{(1)}(i, \mu) \prod_{i=1, i \neq j}^n \frac{\Delta B_{\alpha_i}}{\omega_{\alpha_i}}, \quad (4)$$

где  $\Delta B_{\alpha_i} = \Delta B_{\alpha_i}^{\text{ад}} = B_{\alpha_i}^{(1)}(\lambda, \lambda) - B_{\alpha_i}^{(1)}(\mu, \mu)$  представляет собой изменение равновесных положений ядер при электронном переходе. Известно, что для примесных РЗ ионов  $\Delta B_{\alpha_i}$  малы, и, как показывают вычисления, проводимые в [4] (и наши вычисления тоже), адиабатический вклад в вероятность МБП мал и при увеличении  $n$  быстро стремится к нулю.

Однако для ионов группы железа, а также для межконфигурационных переходов типа  $f \rightarrow d$  стоксовы потери могут быть большими и вклад адиабатического МБП может стать существенным.

Таким образом, для систем типа активированных РЗ ионами кристаллов ограничиться только учетом адиабатического вклада в вероятности МБП неправомерно, поскольку, как следует из формулы (3), однофононные переходы открывают многие каналы БП между мультиплетными группами электронных уровней, что может привести к существенному увеличению общей вероятности МБП.

## 2. Приближенная формула для вычисления вероятностей МБП в примесных РЗ ионах

Формулу (3) можно упростить, также для случая двух вырожденных уровней  $\lambda$  и  $\mu$ . Если в формуле (3) подставить  $\Delta_{\lambda_i \lambda} = \Delta_{\mu_i \mu} = 0$  и считать, что суммы по вырожденным состояниям типа  $\sum_{\nu'} B_{\alpha}^{(1)}(\nu, \nu')$  слабо зависят от состояния  $\nu$ , то, как нетрудно показать, выражение для коэффициентов ЭФВ в этом частном случае совпадает с (4), но где вместо  $\Delta B_{\alpha_i}^{\text{ад}}$  необходимо подставить

$$\Delta B_{\alpha_i}^{\text{вклад}} = \sum_{\lambda'} B_{\alpha_i}^{(1)}(\lambda, \lambda') - \sum_{\mu'} B_{\alpha_i}^{(1)}(\mu, \mu').$$

Таким образом, для вероятности МБП между вырожденными электронными уровнями получим

<sup>1</sup> Адиабатическим является также вклад, полученный из (3) с учетом условия  $\Delta_{\lambda \lambda'}, \Delta_{\mu \mu'} \gg \omega_\alpha$ , однако этот вклад мал, так как содержит большие знаменатели.

$$W_{\lambda, \mu}^{(n)} = \frac{2\pi}{\hbar^{2n-1}} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \left| \sum_{j=1}^n B_{\alpha_j}^{(1)}(\lambda, \mu) \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{\Delta B_{\alpha_i}^{\text{неад}}}{\omega_{\alpha_i}} \right|^2 \times \\ \times \prod_{i=1}^n (1 + \nu_{\alpha_i}) \delta \left( \lambda_{\lambda\mu} - \sum_{i=1}^n \omega_{\alpha_i} \right). \quad (5)$$

Формулу (5) можно применить также для вычисления вероятностей МБП примесных РЗ ионов, штарковские расщепления которых обычно малы ( $\Delta \nu \ll \omega_D$ , где  $\omega_D$  — частота Дебая кристалла).

В длинноволновом приближении переход от коэффициентов ЭФВ к соответствующим матричным элементам можно осуществить с помощью соотношения [10]

$$B_{\alpha}^{(1)}(\nu') = \left( \frac{\hbar \omega_{\alpha}}{M v_0^2} \right)^{1/2} \langle \nu | V^{(1)} | \nu' \rangle \sin \delta_{\alpha}, \quad (6)$$

где  $M$  — масса кристалла,  $v_0$  — средняя скорость акустических волн в кристалле,  $\delta_{\alpha}$  — случайная фаза нормальных колебаний,  $V^{(1)}$  — линейный член в потенциале ЭФВ: его можно представить в виде [13]

$$V^{(1)} = \sum_{l=2, 4, 6} \sum_m A_l \Phi_{lm} Y_{lm}, \quad (7)$$

где  $Y_{lm}$  — сферические функции оптического электрона примесного иона

$$A_l = \frac{Z e^2 r^{-l}}{R_0^{l+1}} \sqrt{\pi}, \quad (8)$$

$r$  — радиус-вектор оптического электрона,  $R_0$  — радиус первой координационной сферы,  $Z$  — эффективный заряд ионов этой сферы.  $\Phi_{lm}$  — функции, зависящие от сферических координат волнового вектора акустических волн  $\kappa$  ( $\vartheta, \varphi$ ) в кристалле. Для кубического окружения их явные виды приведены в [13]. В частности, для  $l=2$  при условии, что все колебательные моды являются продольными, их можно представить в виде<sup>2</sup>

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{20} &= -\frac{16}{3\sqrt{5}} (3 \cos^2 \vartheta - 1), & \Phi_{21} &= -\frac{16\sqrt{2}}{3\sqrt{15}} \sin 2\vartheta e^{-i\varphi}, \\ \Phi_{22} &= -\frac{16\sqrt{2}}{3\sqrt{15}} \sin^2 \vartheta \left( \frac{3}{2} \cos 2\varphi + i \sin 2\varphi \right), & \Phi_{l-m} &= (-1)^m \Phi_{lm}^* \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Потенциал  $V^{(1)}$  (7) записан для фиксированного направления акустических волн в кристалле. Для учета вкладов всех направлений в конечных физических величинах необходимо провести усреднение по углам  $\vartheta$  и  $\varphi$  ( $0 \leq \vartheta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ).

Для вычисления матричных элементов ЭФВ  $\langle \nu | V^{(1)} | \nu' \rangle$  необходимо иметь волновые функции штарковских состояний примесных электронных уровней.

Известно, что для РЗ ионов волновые функции штарковских состояний можно представить в виде линейной комбинации от волновых функций свободного иона  $|\mathcal{J}M_{\mathcal{J}}\rangle = |LS\mathcal{J}M_{\mathcal{J}}\rangle$ , ( $L, S, \mathcal{J}$  — соответственно орбитальный, спиновый и полный моменты;  $M_{\mathcal{J}}$  — проекция полного момента);  $|\nu\rangle = = \sum_M a_{\nu M} |\mathcal{J}, M\rangle$ . Таким образом, задача вычисления матричных элементов ЭФВ сводится к вычислению матричных элементов неприводимых тензорных операторов (каким являются сферические функции оптического электрона примеси) на волновых функциях свободного иона.

Однако расчеты, проводимые на такой основе, являются довольно трудоемкими, так как они подразумевают вычисление матричных элементов между штарковскими состояниями мультиплетов. Задача намного упроща-

<sup>2</sup> Как показывают вычисления, вклады поперечных и продольных колебаний существенно не отличаются.

ется, если в формуле (5) вместо квадратов матричных элементов ввести усредненные по штарковским состояниям их средние значения

$$\left. \begin{aligned} \overline{|B_{\alpha}^{(1)}(\lambda\mu)|^2} &= \frac{1}{2\mathcal{J}_{\mu} + 1} \sum_{\mu} |B_{\alpha}^{(1)}(\lambda\mu)|^2, \\ \overline{\left| \sum_{\nu'} B_{\alpha}^{(1)}(\nu\nu') \right|^2} &= \frac{1}{2\mathcal{J}_{\nu} + 1} \sum_{\nu} \left| \sum_{\nu'} B_{\alpha}^{(1)}(\nu\nu') \right|^2. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Используя условия ортогональности функций  $\Phi_{lm}$  и коэффициентов  $a_{\nu m}$ , а также теорему Вигнера—Экарта, можно формулы (10) представить в виде

$$\left. \begin{aligned} \overline{|B_{\alpha}^{(1)}(\lambda\mu)|^2} &= A_I^2 |\Phi_I|^2 \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{Mv_0^2} \frac{\sin^2 \delta_{\alpha}}{\sin^2 \delta_{\alpha}} \frac{|\langle \mathcal{J}_{\lambda} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\mu} \rangle|^2}{(2\mathcal{J}_{\lambda} + 1)(2\mathcal{J}_{\mu} + 1)}, \\ \overline{\left| \sum_{\nu'} B_{\alpha}^{(1)}(\nu\nu') \right|^2} &= A_I^2 |\Phi_I|^2 \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{Mv_0^2} \frac{\sin^2 \delta_{\alpha}}{\sin^2 \delta_{\alpha}} \frac{|\langle \mathcal{J}_{\nu} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\nu'} \rangle|^2}{2\mathcal{J}_{\nu} + 1}, \\ |\Phi_I|^2 &= \frac{1}{2l + 1} \sum_m |\Phi_{lm}|^2, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

$\langle \mathcal{J}_{\nu} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\nu'} \rangle$  — приведенные матричные элементы. Сохраняя в формуле (5) члены четных порядков и переходя к средним значениям посредством формул (11), окончательно для вероятности МБП получим выражение<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} W_{\lambda\mu}^{(n)} &= \frac{2\pi}{\hbar^{2n-1}} \left( \frac{3\hbar}{2\pi^2 \rho v_0^3} \right)^n A_I^2 A_I^{2(n-1)} |\Phi_I|^2 [|\Phi_I|^2]^{n-1} (\sin^2 \delta_{\alpha})^n I(T) \times \\ &\times \frac{|\langle \mathcal{J}_{\lambda} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\mu} \rangle|^2}{(2\mathcal{J}_{\lambda} + 1)(2\mathcal{J}_{\mu} + 1)} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n-2}{2k} \left[ \frac{\langle \mathcal{J}_{\lambda} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\lambda} \rangle}{\sqrt{2\mathcal{J}_{\lambda} + 1}} \right]^{2(n-1-k)} \left[ \frac{\langle \mathcal{J}_{\mu} \| Y_I \| \mathcal{J}_{\mu} \rangle}{\sqrt{2\mathcal{J}_{\mu} + 1}} \right]^{2k} \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\rho$  — плотность кристалла.

Входящий в (12) интеграл имеет вид

$$I(T) = \int_0^{\omega_D} \dots \int_0^{\omega_D} \omega_1^{2n} \left( \Delta_{\lambda\mu} - \sum_{i=1}^n \omega_i \right) \prod_{i=1}^n \frac{\exp(\hbar\omega_i/kT)}{\exp(\hbar\omega_i/kT) - 1} \omega_i d\omega_i. \quad (13)$$

Интеграл (13) легко вычисляется для двух предельных случаев: при низких температурах ( $T \ll T_D$ ), когда в подынтегральной функции (13) можно пренебречь единицей относительно экспонент, и при высоких температурах ( $T \gg T_D$ ), когда экспоненты можно разлагать в ряд.

Однако известно, что при распаде электронного возбуждения на фононы, преобладающим является процесс возникновения фононов равной частоты [14]. В этом частном случае для входящего в (12) интеграла нетрудно получить выражение

$$I(T) = \left( \frac{\Delta_{\lambda\mu}}{n} \right)^{2n+1} \frac{\exp(\hbar\Delta_{\lambda\mu}/kT)}{[\exp(\hbar\Delta_{\lambda\mu}/nkT) - 1]^n}, \quad (14)$$

которым целесообразно воспользоваться для большого числа фононов ( $n \geq 4$ ), участвующих в процессе БП. Входящие в формулу (12) приведенные матричные элементы легко вычисляются. Для 3d- и 3f-состояний они табулированы в [15].

Для высоковозбужденных электронных состояний, когда приближение LS-связи является довольно грубым, были использованы волновые функции свободных РЗ ионов с учетом перемешивания их термов оператором спин-орбитального взаимодействия. Эти волновые функции приведены в [16].

Число фононов  $n$  в формуле (12) определяется с помощью неравенства  $(n-1)\omega_D \leq \Delta_{\lambda\mu} \leq n\omega_D$ . Температурная зависимость вероятности МБП

<sup>3</sup> Члены нечетных порядков имеют разные знаки и в какой-то степени компенсируют друг друга.

Переход	$\lambda, \mu$		$\Gamma_{ли}, c^{-1}$	$\Gamma_{пел}, c^{-1}$	$\Gamma_{экс}$	Литературная ссылка
Nd <sup>3+</sup>						
${}^4G_{7/2} \rightarrow {}^2G_{7/2}^{(20)}$	1150	3	$2 \cdot 10^8$	$2 \cdot 10^{10}$	$>10^8$	[17]
${}^2H_{11/2}^{(21)} \rightarrow {}^4F_{9/2}$	827	2	$1 \cdot 10^9$		$>10^8$	[17]
${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4F_{7/2}$	993	2	$6 \cdot 10^9$		$>10^8$	[17]
${}^4F_{5/2} \rightarrow {}^4F_{3/2}$	860	2	$4 \cdot 10^9$		$>10^8$	[18]
${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4F_{15/2}$	4690	9	$2 \cdot 10^2$	$5 \cdot 10^{-2}$	$0 \div 10^2$	
${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$	1250	3	$4 \cdot 10^8$	$4 \cdot 10^9$		
${}^4F_{13/2} \rightarrow {}^4F_{11/2}$	1400	3	$3 \cdot 10^8$	$3 \cdot 10^9$		
${}^4I_{11/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$	1150	3	$6 \cdot 10^8$	$5 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^8$	[19]
Er <sup>3+</sup>						
${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4F_{5/2}$	1521	3	$6 \cdot 10^8$			
${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$	2525		$8 \cdot 10^6$			
${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$	1885	4	$4 \cdot 10^7$	$1.4 \cdot 10^6$		
${}^4I_{11/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$	3370	7	$6 \cdot 10^4$	$9 \cdot 10^2$	$10^4$	[20]

определяется последним, хорошо известным в литературе множителем в формуле (14), который при  $T \rightarrow 0$  К стремится к единице.

Количественные расчеты проведены для нескольких каналов МБП ионов Nd<sup>3+</sup> и Er<sup>3+</sup>, находящихся в кристалле ИАГ в виде примесей. При этом использованы следующие значения, входящие в (12) параметров

$$\rho = 4.56 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}, \quad r_0 = 5.58 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}, \quad R_0 = 2.37 \text{ \AA}, \\ \overline{r_{Nd}^2} = 1.001 \text{ ат. ед.}, \quad \overline{r_{Er}^2} = 0.65 \text{ ат. ед.}, \quad \overline{r_{Nd}^3} = 10.3 \text{ ат. ед.}$$

Результаты этих вычислений приведены в таблице (4-й столбец). В первом столбце таблицы приведены каналы МБП в ионах Nd<sup>3+</sup> и Er<sup>3+</sup>, для которых вычисляются вероятности МБП. Во втором столбце приведены величины энергетических щелей между нижним штарковским состоянием верхнего терма и верхним штарковским состоянием нижнего терма, между которыми происходит БП. Число фононов, участвующих в БП, приведены в 3-м столбце. Для сравнения в 5-м столбце таблицы приводятся величины вероятностей этих же каналов МБП, вычисленные на основе так называемой «нелинейной теории» [1]. В 6-м столбце таблицы приведены известные нам экспериментальные значения вероятностей МБП, а в последнем столбце указываются работы, из которых взяты эти значения. Численные значения вероятностей МБП нами найдены при температуре  $T=0$  К и для значения  $Z=1$  ат. ед. Для температуры Дебая использовано ее истинное значение ( $T_D=750$  К) для ИАГ. Из сравнения вычисленных и экспериментальных данных следует, что рассмотренная здесь неадиабатическая теория неплохо интерпретирует имеющиеся в литературе экспериментальные данные по МБП в широком интервале энергетического зазора между примесными электронными уровнями.

Авторы выражают благодарность Л. П. Питаевскому и Б. З. Малкину за ценные обсуждения, а также М. Л. Тер-Микаеляну за постоянный интерес к работе.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Perlin Yu. E., Kaminskii A. A. Phys. St. Sol (b), 1985, vol. 132, N 1, p. 11—40.  
 [2] Перлин Ю. Е. УФН, 1963, т. 80, № 4, с. 553—595.  
 [3] Перлин Ю. Е. В кн.: Спектроскопия кристаллов. Л.: Наука, 1973, с. 58—70.

- [4] *Perlin Yu. E., Kaminskii A. A., Enakii V. N., Vyleghanin D. N.* Phys. St. Sol (b), 1979, vol. 92, N 2, p. 403—410.
- [5] *Rukhov K. K., Sakin V. P.* Phys. St. Sol (b), 1979, vol. 95, N 2, p. 391—402.
- [6] *Перлин Ю. Е., Каминский А. А., Блажа М. Г., Енакий В. Н., Фебченко В. В.* ФТТ, 1982, т. 24, № 3, с. 685—692.
- [7] *Perlin Yu. E., Kaminskii A. A., Blazha M. A., Enakii V. N.* Phys. St. Sol (b), 1982, vol. 112, N 2, p. K125—K130.
- [8] *Малкин Б. З.* ФТТ, 1962, т. 4, № 8, с. 2214—2222.
- [9] *Risalerg L. A., Moos H. W.* Phys. Rev., 1968, vol. 174, N 2, p. 429—438.
- [10] *Сафарян Ф. П.* Изв. АН АрмССР, 1979, т. 14, № 1, с. 16—25.
- [11] *Сафарян Ф. П.* ФТТ, 1979, т. 21, № 1, с. 300—303.
- [12] *Сафарян Ф. П.* ФТТ, 1977, т. 19, № 7, с. 1947—1952; 1978, т. 20, № 5, с. 1563—1565.
- [13] *Сафарян Ф. П.* Препринт ПЛРФ-78-19, Ереван, 1979.
- [14] *Иорданский С. В., Путаевский Л. П.* ЖЭТФ, 1979, т. 76, № 2, с. 769—783.
- [15] *Nielson C. W., Koster G. F.* Spectroscopic coefficients for  $p^n$ ,  $d^n$  and  $f^n$  configurations, The M. I. T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1963. 278 p.
- [16] *Кулагин Н. А., Свиридов Д. Т.* Методы расчета электронных структур свободных и примесных ионов. М.: Наука, 1986.
- [17] *Kushida T., Kinoshita S., Ohtsuki T., Tamada T.* Sol. St. Commun., 1982, vol. 44, N 9, p. 1363—1365.
- [18] *Liao P. F., Weber H. P. J.* Appl. Phys., 1974, vol. 45, N 7, p. 2931—2933.
- [19] *Григорянц В. В., Жаботинский М. Е., Марушев В. М.* Квантовая электроника, 1982, т. 9, № 8, с. 1576—1580.
- [20] *Басиев Т. Т., Жариков Е. В., Жеков В. И., Мурина Т. М., Осико В. В., Прохоров А. М., Стариков Б. П., Тимошечкин Н. И., Щербаков И. А.* Квантовая электроника, 1976, т. 3, № 7, с. 1471—1477.

Институт физических исследований  
АН АрмССР  
Аштарак

Поступило в Редакцию  
26 сентября 1987 г.