

СОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ

53(048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ
И АСТРОНОМИИ АКАДЕМИИ НАУК СССР
И ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
И ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК
АКАДЕМИИ НАУК ЭССР**

(Таллин — Тарту, 20—23 апреля 1976 г.)

С 20 по 23 апреля 1976 г. в Таллине и Тарту состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии АН СССР и Отделения физико-математических и технических наук АН ЭССР. На сессии были заслушаны доклады:

1. Я. Б. Зельдович. Структура систем галактик.
2. Я. Э. Эйнасто. Структура систем галактик.
3. А. А. Сапар. Взаимодействие излучения и вещества в звездных атмосферах.
4. У. Х. Уус. Появление элементов, синтезированных в недрах звезды, на ее поверхности.
5. А. Я. Киппер. О многозначности красного смещения квазаров.
6. В. Л. Глизбург. О сверхпроводимости и сверхтекучести (некоторые современные проблемы).
7. К. К. Ребане, П. М. Саари, Горячая люминесценция и процессы релаксации в центрах люминесценции в кристаллах.
8. Ж. И. Алферов. Современные проблемы физики полупроводниковых гетероструктур.
9. Ч. Б. Лушик, И. Л. Куусманн. Люминесценция, автолокализация и распад экситонов в ионных кристаллах.
10. Х. Х. Ыйглане. О свойствах симметрии лагранжианов четырехфермионного взаимодействия.
11. Н. Н. Кристофель, П. И. Консин. Вибронная теория сегнетоэлектричества.
12. Г. Г. Лийдья. Затухание люминесценции триплетного состояния автолокализованного экситона (квазимолекулы X_2^+ -щелочногалоидных кристаллов в магнитном поле).
13. Э. Т. Липпмаа. Магнитный резонанс редких ядер высокого разрешения в твердых телах.

Ниже публикуется краткое содержание части прочитанных докладов.

523.85(048)

Я. Э. Эйнасто. Структура систем галактик. В последние годы много внимания уделялось парадоксу массы в галактиках и системах галактик. Парадокс состоит в том, что масса системы, вычисленная по средним движениям галактик в ней, оказывается на порядок больше, чем суммарная масса видимых галактик.

Для объяснения парадокса массы можно предложить следующие альтернативы:

- а) системы галактик не являются физически и гравитационно связанными, а представляют собой случайные и временные сгущивания независимо формирующихся галактик;
- б) системы галактик распадаются;
- в) системы галактик представляют собой гравитационно связанные сгущивания независимо формирующихся галактик;
- г) системы галактик представляют собой гравитационно связанные агрегаты совместно образовавшихся галактик.

Совокупность данных о структуре систем галактик говорит в пользу последней альтернативы.

Системы галактик изолированы друг от друга пространством с очень низкой плотностью галактик. Галактики поля образуют гипергалактики — системы, состоящие из карликовых галактик и межгалактического вещества, окружающих гигантские галактики¹.

В гипергалактиках имеется сегрегация галактик по морфологическому типу: эллиптические спутники сильно концентрируются к главной галактике, а спиральные и иррегулярные — слабее². Морфологический тип неэллиптических спутников в среднем тем позднее, чем дальше от главной галактики находится спутник. Средняя светимость спутников тем больше, чем больше светимость главной галактики, тип активности различен у центральных гигантских и у периферийных карликовых галактик¹.

Имеется тесная корреляция между динамическими характеристиками галактик и их систем. Дисперсия скоростей звезд в главной галактике равна приблизительно дисперсии скоростей галактик-спутников в системе. Дисперсия скоростей звезд внутри галактик-спутников тем меньше, чем дальше спутники находятся от главной галактики³.

Спутники нашей Галактики (карликовые галактики и газовые облака) имеют как положительные, так и отрицательные скорости по отношению к центру Галактики. Это исключает возможность того, что наша Гипергалактика является нестационарной и расширяющейся системой⁴. Против нестационарности говорит и возраст галактик.

Сводка наблюдательных аргументов приведена в таблице, где приняты следующие обозначения: «+» — наблюдения подтверждают данную гипотезу, «-» — наблюдения противоречат ей, «0» — возможна различная интерпретация наблюдений. Видно, что единственной гипотезой, которая согласуется со всеми данными, является последняя из перечисленных выше альтернатив.

Ожидаемые свойства	Природа гипергалактик							
	Концентрация	Сегрегация	Светимость	Динамика	Возраст	Морфология	Активность	Скрытая масса
Случайное временное сгущивание независимо формирующихся галактик	—	—	—	—	0	—	—	—
Гравитационно связанное сгущивание независимо формирующихся галактик	0	—	—	—	0	—	0	+
Распадающаяся система совместно образовавшихся галактик	+	—	+	—	—	+	+	—
Гравитационно связанная система совместно образовавшихся галактик	+	+	+	+	+	+	+	+

Следовательно, традиционное представление о галактиках как об изолированных объектах, требует пересмотра. Галактики в гипергалактиках и скоплениях галактик находятся в тесном физическом взаимодействии.

Из приведенных аргументов вытекает, что парадокс массы объясняется наличием в системах галактик невидимой короны, т. е. скрытой массы, природа которой пока не ясна.

Движение спутников показывает, что невидимая корона окружает и нашу Галактику. Спутники Галактики образуют диск, расположенный почти под прямым углом к плоскости Галактики. Кроме других объектов, в этом диске австралийские радиоастрономы⁵ недавно открыли газовую струю — Магелланов поток, который с большой скоростью приближается к Галактике. По скоростям газовых облаков, используя теорему о вириале, можно вычислить массу Гипергалактики. Эта масса — $1,2 \cdot 10^{12} M_{\odot}$ — примерно в 10 раз превышает массу видимой Галактики⁴.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Einasto, J. Jaaniste, M. Jõeveer, A. Kaasik, P. Kalamees, E. Saar, E. Tago, P. Traat, J. Vennik, A. D. Chernin, Tartu Teated № 48, 1974.

2. J. Einasto, E. Saar, A. Kaasik, A. D. Chernin, Nature 252, 111 (1974).
3. J. Einasto, M. Jõeveer, A. Kaasik, J. Vennik, Tartu Preprint No. 12, 1976.
4. J. Einasto, U. Haud, M. Jõeveer, A. Kaasik, Tartu Preprint No. 10, 1976.
5. D. S. Mathewson, M. N. Cleary, J. D. Murray, Astrophys. J. 190, 291 (1974).

523.877(048)

А. А. Сапар. Взаимодействие излучения и вещества в звездных атмосферах. Атмосфера звезды является переходной зоной между недрами звезды и межзвездной средой. Взаимодействием излучения и вещества в звездных атмосферах определяются основные особенности структуры звездных атмосфер, их термодинамическое состояние и возникновение звездного спектра.

В Тартуской астрофизической обсерватории группой теоретиков-астрофизиков проводились расчеты строения горячих протяженных звездных атмосфер с истечением вещества и расчеты сети моделей плоскопараллельных звездных атмосфер спектральных классов O — A, при различных эффективных гравитационных ускорениях и химических составах. При этом разрабатывались рациональные алгоритмы расчета, в частности для решения уравнения переноса. Найдены аналитические решения нескольких задач переноса излучения в спектральных линиях. Проведены расчеты рекомбинационного спектра нескольких ионов для физических условий, соответствующих оболочкам горячих звезд — сверхгигантов, выявлена необходимость расчета волновых функций ионов C, N и O в многоконфигурационном приближении для объяснения особенностей их спектров, причем найдены соответствующие формулы. Изучено образование функции профиля спектральных линий водородоподобных ионов в плазме. Из соображений квантовой электродинамики выведено уравнение переноса излучения, дающее поправки в коэффициент непрозрачности вещества, которые нужно учесть и для условий звездных атмосфер. Результаты частью опубликованы, а частично будут опубликованы в публикациях Тартуской астрофизической обсерватории.

523.877(048)

У. Х. Уус. Появление элементов, синтезированных в недрах звезды, на ее поверхности. Звезды низкой поверхностной температуры и большого радиуса — красные гиганты — часто имеют аномальный поверхностный химический состав, что связывается с наличием у этих звезд толстых конвективных оболочек, обеспечивающих разнос продуктов ядерного горения из недр звезды во всю оболочку вплоть до поверхности звезды. Теоретическими расчетами выявлено, что у определенных красных гигантов внешняя конвективная зона может постоянно охватывать часть той внутренней области, где происходит ядерное горение. В этом случае в ядерных реакциях участвует все вещество звездной оболочки, так как конвекция очень эффективно перемешивает вещество оболочки.

Возможность постоянного глубокого перемешивания возникает в звездах с массой примерно от 4 до 8 масс Солнца на стадии роста вырожденного углеродно-кислородного ядра. Изменения химического состава оболочки, вызванные проникновением конвекции в слой ядерного горения водорода, состоят в последовательном установлении равновесных по отношению к углеродному циклу горения водорода отношений концентраций изотопов углерода, азота и кислорода, начиная с изотопов с наименьшей продолжительностью жизни, и в некотором увеличении содержания гелия. Только равновесное содержание кислорода не успевает устанавливаться в течение стадии роста ядра звезды.

К сожалению, оказалось невозможным определить теоретически точный охват перемешивания, так как ввиду недостаточной развитости статистической гидродинамики пришлось при моделировании строения конвективных областей звезд воспользоваться довольно грубой трактовкой турбулентной конвекции.

Изложенные в докладе результаты опубликованы в работах: У. Х. Уус, Научные информации Астрон. совета АН СССР, № 20, 60; № 20, 64 (1971); № 23, 85, 1972); № 26, 83, 96 (1973).

523.84(048)

А. Я. Киппер. О многозначности красного смещения квазаров*). В том случае, если большое красное смещение квазаров имеет космологическое происхождение, квазары представляют собой наиболее далекие объекты Все-

*) Взгляды автора являются дискуссионными. (Прим. Бюро Отделения общей физики и астрономии АН СССР).

ленной. Величина красного смещения квазаров в большинстве случаев определяется измерением эмиссионных линий спектра. Однако уже при $z = 1,9$ доминируют линии поглощения, а при $z > 2,5$ спектр квазара напоминает спектр обычной звезды средних спектральных классов с резкими линиями поглощения.

Одной из замечательных особенностей спектра квазаров является то, что величина красного смещения z_{abs} , определяемого измерением линий поглощения, оказывается многозначной. Так, в спектре квазара некоторая, в нормальных условиях одиночная линия, например линия L_α , может наблюдаться как целая серия линий. Проблема многозначности красного смещения z_{abs} интересна и тем, что она может затронуть более общие проблемы теоретической физики.

Многозначность красного смещения z_{abs} большинство исследователей объясняют предположением о наличии нескольких расширяющихся газовых облаков между ядром квазара и наблюдателем; эти облака расположены или вокруг ядра, или на различных расстояниях между объектом и наблюдателем.

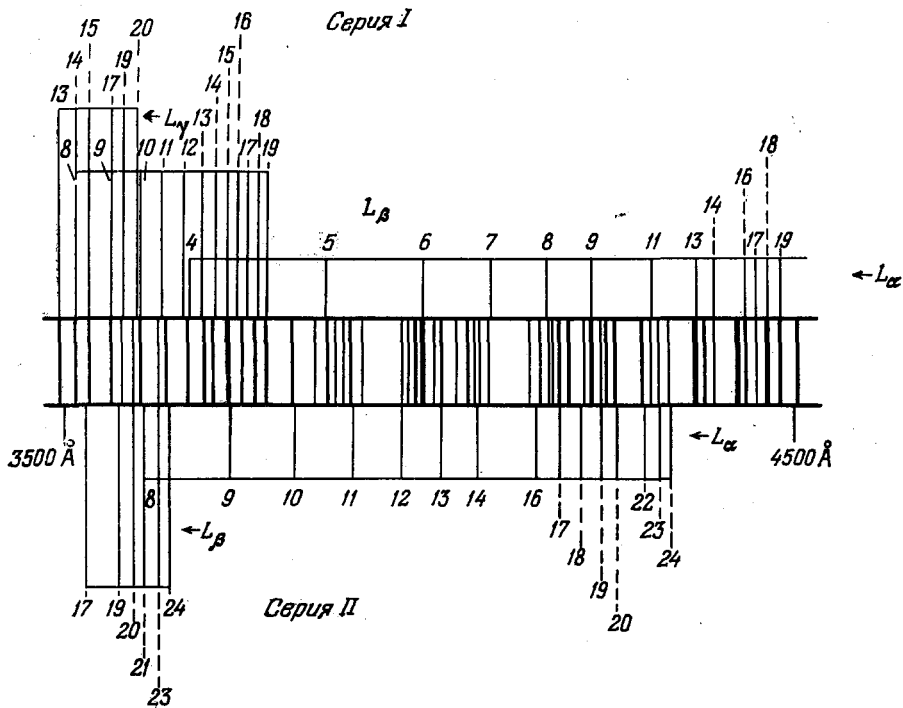


Рис. 1.

Автором доклада выдвигается, однако, гипотеза, по которой многозначность красного смещения z_{abs} является следствием свойств самого фотона и вызывается длительным пребыванием фотона в космологическом пространстве. Фотон обычно считается частицей, время жизни которой практически бесконечно. Однако при космологических интервалах времени можно ожидать исчезновения фотона ввиду непрерывного уменьшения энергии из-за красного смещения. Такой вывод вытекает из квантования электромагнитного поля в космологии Де Ситтера и наличия так называемой пулевой энергии гармонического осциллятора. Каждая монохроматическая волна считается энергетически эквивалентной гармоническому осциллятору.

Ввиду конечного времени жизни осциллятора величина красного смещения z далеких космологических объектов теряет однозначность. Это касается в первую очередь z_{abs} . В докладе приводится соответствующая формула. Для наглядности соответствия формулы наблюдениям построен график (рис. 1).

Из-за многозначности красного смещения z_{abs} из одной линии получаются целые серии линий, длины волн λ которых вычисляются по соответствующим формулам. Для примера выбран квазар 4С 05.34, в спектре которого наблюдается L_α , а также и L_β . Многозначность линий в фиолетовой области спектра этого квазара действительно поразительна для объектов, спектры которых обычно бедны линиями поглощения. На чертеже (рис. 2) выделены линии, принадлежащие различным сериям, порождаемым линиями L_α и L_β .

Конечное время жизни осциллятора означает, что через некоторые промежутки времени исчезают одиночные фотоны. Этот процесс может быть истолкован как поглощение энергии фотона космологическим пространством. Автором была высказана мысль, что космологическое красное смещение представляет собой эффект этого поглощения. Но тогда возникает вопрос — как согласовать утверждение, согласно которому космологическое красное смещение представляет эффект Допплера разбегающихся

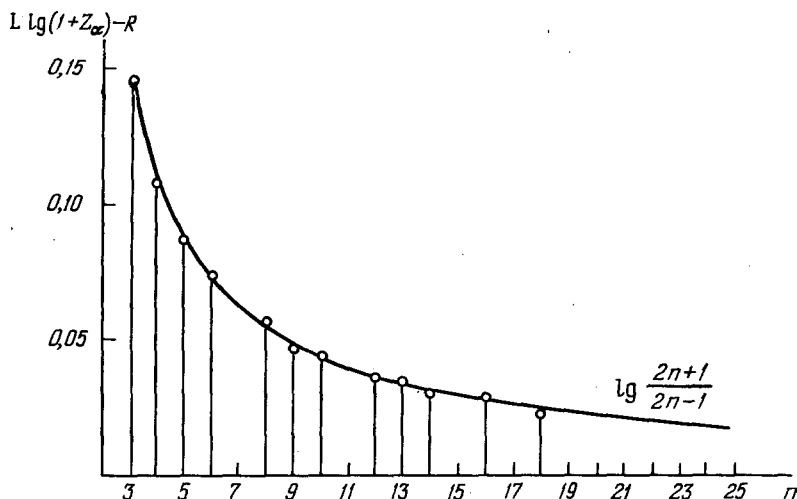


Рис. 2.

галактик с утверждением о поглощении энергии фотона космологическим пространством? Такое согласование вполне возможно и теория расширяющейся Вселенной не противоречит гипотезе, выдвинутой в настоящем докладе. Строгое доказательство этого согласия проведено на основе космологии Де Ситтера, но еще не опубликовано. Другие утверждения опубликованы в следующих изданиях: *Астрофизика* 10 (2) (май 1974 г.); Публ. Тарт. астрофиз. обсерв. 40, 12, 74 (1972); 41 (1973).

В печати находится статья об использовании новейших измерений спектров квазаров. Рис. 1 и 2 заимствованы из этой статьи.

ЛИТЕРАТУРА

Д. Ж. Бербидж, М. Бербидж, Квазары, М., «Мир», 1969.
 Я. Б. Зельдович, И. Д. Новиков, Строение и эволюция Вселенной, М., «Наука», 1975.

[532.132+537.312.62](048)

В. Л. Гинзбург. О сверхпроводимости и сверхтекучести (некоторые современные проблемы). Обнаруженный на Земле только в 1895 г. гелий был впервые сжижен в 1908 г. (температура кипения при атмосферном давлении $T_b = 4,215 \text{ }^\circ\text{K}$). В 1911 г. была открыта сверхпроводимость (на примере ртути, для которой в α -фазе критическая температура $T_c = 4,16 \text{ }^\circ\text{K}$). Менее известен тот факт, что первое указание на существование λ -перехода в жидком гелии было получено в том же 1911 г. Однако лишь в 1932 г. λ -переход был ярко выявлен по ходу теплоемкости; «сверхтеплопроводность» гелия II обнаружена в 1935 г. и, наконец, в 1938 г. была открыта его сверхтекучесть. С тех пор стало ясно, что сверхпроводимость это сверхтекучесть электронов в металле, и в настоящее время часто используется термин «сверхжидкость» (superfluid) в применении как к нейтральным, так и к заряженным системам, в которых может иметь место течение без трения или сопротивления. В этой связи, по крайней мере для педагогических целей, особенно уместно освещать проблемы сверхпроводимости и сверхтекучести совместно, с единых позиций (удачным примером такого изложения может служить книга ¹).

Несмотря на то, что сверхжидкости изучаются уже много десятилетий, внимание к ним отнюдь не уменьшалось и соответствующая проблематика занимает в современной физике видное место. В качестве причин можно указать на все возрастающие технические применения сверхпроводников, стремление повысить T_c и другие критические параметры сверхпроводников, открытие и изучение ряда тонких эффектов, особен-

но в неравновесных и нестационарных условиях, исследование гелия II вблизи λ -точки, открытие сверхтекучести ^3He , использование предположений и теории сверхжидкостей в астрофизике и ядерной физике (особенно важно, что нейтронная жидкость в довольно широкой области плотностей должна быть сверхтекучей).

В докладе характеризуются некоторые из перечисленных направлений, привлекающих в настоящее время внимание при исследованиях сверхпроводимости и сверхтекучести. Конкретно обсуждаются:

Проблема высокотемпературной сверхпроводимости (см. ^{2,3} и указанную там литературу). Вопрос о сверхпроводимости в неравновесных условиях, когда открывается огромное число новых возможностей по сравнению с равновесным случаем. В качестве примеров приводятся термоэлектрические явления ⁴ и возможность появления при инверсной заселенности уровней сверхпроводимости при отталкивании между электронами ^{2,5} (о неравновесных сверхпроводниках см. также ⁶).

← Поведение гелия II вблизи λ -точки ⁷. Кроме того, сделан ряд замечаний, касающихся сверхтекучести ^3He (см. ^{8,9}), сверхтекучести и сверхпроводимости в нейтронных звездах ¹⁰ и возможности наблюдения сверхтекучести в жидком водороде (в частности, при отрицательных давлениях, т. е. при растяжении) ¹¹. Следует подчеркнуть также, что с представлениями и теорией сверхжидкостей связаны некоторые исследования, относящиеся к теории лазеров ¹², совокупности экситонов в полупроводниках ¹³ и другим актуальным физическим задачам (особенно нужно упомянуть о двумерных, квазидвумерных и квазиодномерных системах, в частности в плане наблюдения в них сверхтекучести и сверхпроводимости; см. ¹⁴ и указанную там литературу). Несомненно, вся эта проблематика будет находиться в центре внимания и в ближайшем будущем.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. R. Tilley, J. Tilley, Superfluidity and Superconductivity, Lnd., Van Nostrand — Reinhold, 1974 (в издательстве «Мир» готовится русский перевод).
2. Л. Н. Булаевский, В. Л. Гинзбург, Г. Ф. Жарков, Д. А. Киржниц, Ю. В. Копаев, Е. Г. Максимов, Д. И. Хомский, Проблема высокотемпературной сверхпроводимости, М., «Наука», 1976.
3. В. Л. Гинзбург, УФН 118, 345 (1976).
4. В. Л. Гинзбург, Г. Ф. Жарков, А. А. Собянин, Письма ЖЭТФ 20, 223, 658 (1974).
5. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, ЖЭТФ 70, 1051 (1976).
6. Д. А. Киржниц, Ю. В. Копаев, Письма ЖЭТФ 17, 379 (1973).
7. Е. Ф. Елесин, Ю. В. Копаев, Р. Х. Тимеров, ЖЭТФ 65, 2343 (1973).
8. W. H. Parker, Phys. Rev. B12, 3667 (1975).
9. В. Л. Гинзбург, А. А. Собянин, УФН 120, 153 (1976).
10. J. Wheatley, Rev. Mod. Phys. 47, 445 (1975); Phys. Today 29 (2), 32 (1976).
11. A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. 47, 331 (1975).
12. В. Л. Гинзбург, УФН 97, 601 (1969).
13. G. Baum, Ch. Pethick, Ann. Rev. Nucl. Sci. 25, 27 (1975).
14. В. Л. Гинзбург, А. А. Собянин, Письма ЖЭТФ 15, 343 (1972).
15. M. Vetz, T. T. Chung, J. Low. Temp. Phys. 17, 480 (1974).
16. В. А. Акулиничев, В. А. Буланов, ЖЭТФ 65, 668 (1973); Акуст. ж. 20, 817 (1974); Препринт Ин-та физики высоких энергий ППК 76-14, (1976).
17. H. Haken, Rev. Mod. Phys. 47, 67 (1975); Zs. Phys. B20, 413; 21, 105; 22, 69, 73 (1975).
18. С. А. Москаленко, Бозе-эйнштейновская конденсация экситонов и биэкситонов, Кишинев, «Штиинца» 1970; ФТТ 4, 276 (1962).
19. Л. В. Келдыш, в кн. Проблемы теоретической физики. Сборник памяти И. Е. Тамма, М., «Наука», 1972, стр. 433.
20. В. Л. Гинзбург, УФН 113, 335 (1974).

535.37(048)

К. К. Ребане, П. М. Саари. Горячая люминесценция и процессы релаксации в центрах люминесценции в кристаллах. Горячую люминесценцию (ГЛ) можно представить себе в хорошем приближении как свечение, испускаемое центром люминесценции в первые моменты после акта возбуждения, до установления теплового равновесия центра с окружающей средой (в случае примесного атома или молекулы в кристалле — с колебаниями кристалла).

Поскольку ГЛ берет начало из непрорелаксированных подсостояний (колебательных, вращательных и др.) возбужденного электронного состояния центра, она доставляет информацию о процессах релаксации этих подсостояний. Подавляющее большинство центров люминесценции в кристаллах является быстрорелаксирующим —

время колебательной релаксации исчисляется в пикосекундах и на несколько порядков величины меньше времени жизни возбужденного электронного состояния. Таким образом, ГЛ позволяет исследовать процессы пикосекундной длительности в обычных условиях непрерывного возбуждения умеренной мощности.

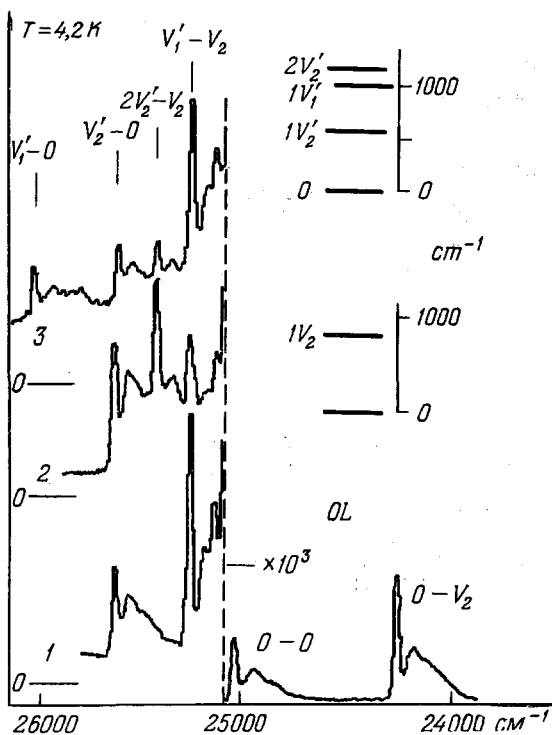
Последовательное описание ГЛ дается в рамках единого двухфотонного подхода к проблеме образования вторичного свечения¹. При таком подходе для данного быстрорелаксирующего центра (или комплекса центров²) и потока падающих на этот центр фотонов данной частоты вычисляется весь поток вторичного свечения, который затем разделяется на обычную люминесценцию, рассеяние и оставшуюся, по своим свойствам промежуточную между ними часть — ГЛ.

Основные отличительные свойства ГЛ четко продемонстрировались в цикле экспериментов по обнаружению ГЛ на примесной молекуле NO_2 в щелочногалогенных кристаллах³. Среди них для экспериментального выделения ГЛ особенно важны проявление в спектре при низких температурах не только колебаний основного, но и возбужденного электронных состояний, позволяющее вычислить местоположение горячих линий в спектре, и характерная зависимость спектра ГЛ от длины волны возбуждающего света в пределах одного электронного перехода (см. рисунок). ГЛ существенно меньше подвергнута температурному или другому типу тушению, чем обычная люминесценция.

К настоящему времени обнаружена и исследована ГЛ различных объектов: замороженных органических растворов (систем Шпольского)⁴, полупроводников⁵, непримесных молекулярных и ионных кристаллов и др. (см. обзор⁶).

В условиях непрерывного возбуждения информация о процессах релаксации в возбужденном электронном состоянии отражается в интенсивности ГЛ (которая весьма мала по сравнению с обычной люминесценцией в быстрорелаксирующих системах). Измеренные (при спектрально селективном возбуждении на разные уровни) интенсивности линий ГЛ позволяют в комбинации с другими спектроскопическими данными получать весьма детальные данные о кинетике релаксации. Этим методом³ определены времена колебательной (вращательной) релаксации и прочих безызлучательных переходов в системах, где наблюдается ГЛ. Самые короткие из определенных — времена жизни колебательных уровней молекулы антрацена в замороженном *n*-гексане, лежащие в пределах от 1,5 до 5 псек.⁶ Исследовано также воздействие разных факторов (тип матрицы-основания, температура, давление) на процессы релаксации.

Если релаксация происходит одновременно по разным степеням свободы системы, в спектрах ГЛ, исходящей с разных уровней одной степени свободы, отражается временная зависимость ГЛ по другой степени свободы. Таким путем на примере $\text{KCl} - \text{NO}_2$ получены «временные пробы» процесса вращательной релаксации⁶, в определенной степени аналогичные тем, которые могут быть получены в эксперименте с импульсным возбуждением и временным разрешением пикосекундного диапазона.



Зависимость спектра ГЛ $\text{KCl} = \text{NO}_2$ от длины волны возбуждающего света.

Показана схема нижних уровней внутримолекулярных колебаний NO_2 в возбужденном и основном электронных состояниях и указаны положения соответствующих горячих линий в коротковолновой от обычной люминесценции (ОЛ) спектральной области. Данные об интенсивностях линий ГЛ позволили определить времена релаксационных переходов с колебательных уровней $1v_2$, $1v_1$, $2v_2$; например, время жизни уровня $1v_2$ относительно колебательной релаксации составляет 550 периодов колебания, или 30 псек, полное время жизни уровня ($\tau = 18$ псек) короче из-за конкурирующей безызлучательной дезактивации ($\tau_2^T = 45$ псек) электронного состояния.

Материал доклада в основном опубликован в ⁶, последние результаты по экспериментальному исследованию ГЛ будут опубликованы в Изв. АН СССР, сер. физ. (доклады 23-й Всесоюзной конференции по люминесценции).

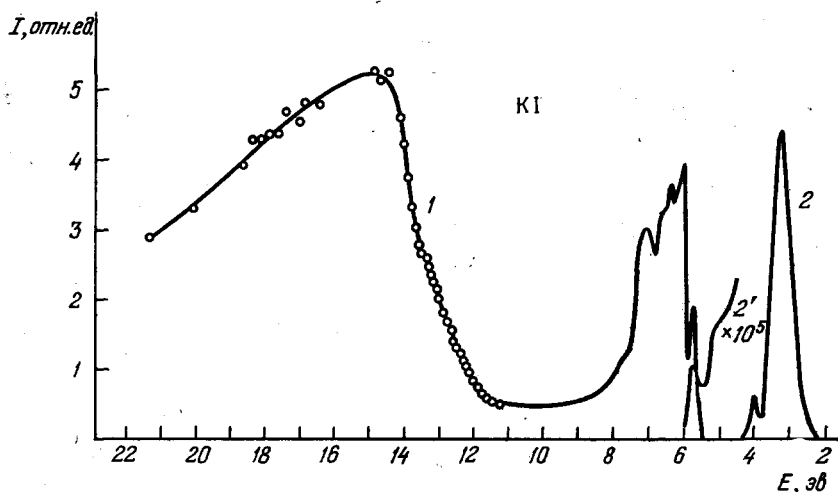
ЛИТЕРАТУРА

1. И. Ю. Техвер, В. В. Хижняков, Изв. АН ЭССР, сер. физ.-матем. и техн. наук 15, 9 (1966).
V. Hizhnyakov, K. Rebane, I. Tehver, in: Proc. of Intern. Conference on Scattering Spectra of Solids (New York, 1968), N. Y., Springer-Verlag, 1969, p. 513.
2. В. В. Хижняков, И. Ю. Техвер, ЖЭТФ 69, 599 (1975).
3. P. Saari, K. Rebane, Sol. State Comm. 7, 887 (1969).
K. K. Rebane, P. M. Saari, T. X. Mauring, Изв. АН СССР, сер. физ. 37, 848 (1973).
4. Т. Б. Тамм, Опт. и спектр. 32, 623 (1972).
Т. Б. Тамм, П. М. Саари, *ibid.* 36, 328 (1974).
5. S. Peregogov, Phys. Stat. Sol. b68, 9 (1975).
6. K. Rebane, P. Saari, in: Proc. of Intern. Conference on Luminescence, Tokyo, September 1975, J. Luminescence 12/13, 23 (1976); Hot luminescence and relaxation processes in the centres of luminescence. Preprint FI-42, Tartu, 1976.

535.376(048)

Ч. Б. Луцик, И. Л. Куусманн. Люминесценция, автолокализация и распад экситонов в ионных кристаллах. Представление о возможности существования в кристаллах свободных и samozaxваченных (автолокализованных) экситонов ввел Френкель ¹. Ландау ² и Рашба ³ проанализировали необходимость энергии активации для автолокализации электронов и экситонов в твердых телах.

Многочисленные эксперименты показали, что в узкощелевых полупроводниках существуют лишь свободные экситоны. Экспериментальное исследование экситонов



в широкощелевых ионных кристаллах осуществлено в Институте физики АН ЭССР, для чего потребовалось разработать методы измерения оптических характеристик в области спектра до 22 эВ, методы регистрации слабых свечений при возбуждении кристаллов импульсными пучками электронов, а также получения кристаллов высокой чистоты.

Установлено, что в щелочногалогидных кристаллах экситоны существуют в трех состояниях: свободные экситоны ⁴, samozaxваченные одногалогидные экситоны $(X_0e)^5$ и автолокализованные двухгалогидные экситоны $(X_2^-e)^{6,7}$, у которых дырочная компонента размазана по двум ионам галоида (X^-) . Спектры свечения всех трех видов экситонов при возбуждении кристаллов KI электронами 5 кэВ при 67 °К приведены на рисунке (кривые 2, 2'). Широкие интенсивные полосы 3,3 эВ и 4,1 эВ соответствуют триплетным и синглетным двухгалогидным экситонам. Слабая узкая полоса 5,75 эВ, почти резонансная с полосой собственного поглощения, обусловлена излучательной аннигиляцией свободных экситонов. Люминесценция одногалогидных samozaxваченных экситонов проявляется в области 5,2 эВ.

На рисунке (кривая 1) приведен измеренный для KI при 80 °K спектр возбуждения люминесценции 3,3 эв. Существуют три различных механизма возникновения автолокализованных двухгалоидных экситонов: при прямом оптическом создании одногалоидных экситонов (область 5,7—7,0 эв), при рекомбинации электронов с автолокализованными дырками (7—11 эв) и при создании фотонами горячих фотоэлектронов, способных генерировать экситоны электронным ударом (11,5—17 эв).

Замораживание свечения двухгалоидных экситонов в NaI и KI при охлаждении от 80 °K до 4 °K и параллельное усиление свечения свободных экситонов в NaI и свечения примесных центров в KI—TI свидетельствует, что процесс двухцентровой автолокализации экситонов требует энергии активации 7,8. Благодаря этому в щелочных иодидах при низких температурах свободные и автолокализованные экситоны сосуществуют 4, 7, 8.

	e^0	e_{A1}^0	e_{A2}^0	e_A^-	e_A^+
NaI	5,55		4,2		+
KI	5,75	5,2	4,1; 3,3		+
RbI	5,58	5,2	3,8; 3,1		+
KCl		6,8	2,4		+
KBr		5,8; 6,3	4,2; 2,2		+
RbBr		5,8; 6,3	4,1; 2,1		+
CsBr		5,45; 6,0	4,95; 3,4		+
LiH	4,92		4,5; 3,3	+	
LiD	5,02		4,5; 3,3	+	
MgO	7,65				
AgCl	5,1	2,4			+
AgBr	2,8				
PbBr ₂	4,0	2,7		+	
CaWO ₄		5,8			+

В таблице приведены положения полос излучения (в электрон-вольтах) свободных экситонов (e^0) и одноцентровых и двухцентровых автолокализованных экситонов (e_{A1}^0 и e_{A2}^0) для ряда изученных ионных кристаллов. Знаком + отмечены обнаруженные экспериментально случаи автолокализации дырок (e_A^+) и предполагаемые случаи автолокализации электронов (e_A^-). Как видно из таблицы, сосуществование свободных и автолокализованных экситонов возможно как при одноцентровой, так и при двухцентровой автолокализации, как при остановке дырочной, так и при самозахвате электронной компоненты экситонов.

В щелочногалогидных кристаллах создание дефектов при облучении в реакторе, рентгеновской и вакуумной ультрафиолетовой радиацией происходит одинаково 9. В кристаллах с автолокализующимися экситонами осуществляется распад экситонов с рождением френкелевских дефектов 10. Наиболее эффективно экситоны распадаются с рождением F-центров и междоузельных атомов галоида.

Анализ причин этого необычного явления, требующего совместного теоретического анализа электронных возбуждений и структурных дефектов в твердых телах, показал, что в момент перехода одногалоидных экситонов в двухгалоидное состояние возникают сильные локальные колебания, приводящие к смещению молекулы X_2^- в один анионный узел с освобождением второго для образования F-центра. В кристаллах типа MgO, где автолокализация экситонов не осуществляется, распад высокоподвижных экситонов на дефекты невозможен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. И. Френкель, ЖЭТФ 6, 647 (1936).
2. L. D. Landau, Sov. Phys. 3, 664 (1933).
3. Э. И. Рашба, Опт. и спектр. 2, 75, 88 (1957).
4. И. Л. Куусманн, П. Х. Либлик, Ч. Б. Лушик, Письма ЖЭТФ 21, 161 (1975).
5. И. Л. Куусманн, Ч. Б. Лушик, Изв. АН СССР, сер. физ. 40, 1785 (1976).
6. М. Н. Каблер, М. Д. Марроне, В. П. Фаулер, ibid. 37, 341 (1973).
7. Ч. Б. Лушик, Г. Г. Лийдя, ibid., стр. 334.
8. И. Л. Куусманн, П. Х. Либлик, Г. Г. Лийдя, Н. Е. Лушик, Ч. Б. Лушик, Т. А. Соовик, ФТТ 17, 3546 (1975).
9. Ч. Б. Лушик, Г. Г. Лийдя, М. А. Эланго, ФТТ 6, 2256 (1964).
10. Ч. Б. Лушик, И. К. Витол, М. А. Эланго, ФТТ 10, 2753 (1968).

Х. Х. Ыйглане. О свойствах симметрии лагранжианов четырехфермионного взаимодействия. Лагранжиан четырехфермионного взаимодействия имеет общий вид

$$\mathcal{L} = \sum_I [C_I \mathcal{L}_I + C_I' \mathcal{L}_I'], \quad (1)$$

где

$$\mathcal{L}_I = \sum_{i \in I} \langle \bar{\psi}_1 \Gamma_i \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 \Gamma_i \psi_4 \rangle \quad (2)$$

и

$$\mathcal{L}_I' = \sum_{i \in I} \langle \bar{\psi}_1 \Gamma_i \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 \Gamma_0 \Gamma_i \psi_4 \rangle \quad (3)$$

— соответственно скалярная и псевдоскалярная части лагранжиана. Здесь Γ_i — элементы группы Дирака в четырехрядном представлении (матрицы Дирака), причем $\Gamma = \gamma^5$ — псевдоскалярная матрица; $I = S, P, V, A, T$. Константы связи являются в общем случае комплексными. Таким образом, для определения вида лагранжиана четырехфермионного взаимодействия необходимо измерить в эксперименте 19 вещественных параметров. К настоящему времени измерены из них только 6. Значения измеренных параметров в процессах слабого взаимодействия очень хорошо согласуются с лагранжианом так называемого, $V - A$ -взаимодействия

$$\mathcal{L}_{(V-A)} = C \langle \bar{\psi}_1 (1 - \gamma^5) \gamma^\alpha \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 (1 - \gamma^5) \gamma^\alpha \psi_4 \rangle, \quad (4)$$

но с экспериментальной точки зрения нельзя считать лагранжиан $V - A$ -взаимодействия единственно возможным.

Во многих работах исследовано поведение скалярного лагранжиана \mathcal{L}_I под действием преобразования Фирца Φ :

$$\Phi \langle \bar{\psi}_1 \Gamma_i \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 \Gamma_i \psi_4 \rangle = \langle \bar{\psi}_1 \Gamma_i \psi_4 \rangle \langle \bar{\psi}_3 \Gamma_i \psi_2 \rangle. \quad (5)$$

Оказывается, из скалярных лагранжианов \mathcal{L}_I можно составить 3 антиинвариантных и 2 инвариантных комбинации по отношению к преобразованию Фирца¹.

Рассматриваем эту проблему в более общем случае смешанного лагранжиана (1). Потребуем, чтобы смешанный лагранжиан был собственным состоянием операции

$$\Phi \mathcal{L} = \pm \mathcal{L}. \quad (6)$$

Из требования антиинвариантности \mathcal{L} получим 6 дополнительных соотношений между константами C_I ; произвольными остаются только 4 комплексных коэффициента. Этот вариант противоречит эксперименту с точностью до CP -неинвариантных эффектов. Из требования инвариантности \mathcal{L} получим 4 дополнительных соотношения и произвольными остаются 6 констант. Из требования T -инвариантности следует вещественность констант связи. В таком случае единственно возможным лагранжианом слабого четырехфермионного взаимодействия, который согласуется с экспериментальными данными, является лагранжиан $V - A$ -взаимодействия. Нам представляется, что требование фирц-инвариантности представляет интерес также в кварковых взаимодействиях, хотя здесь прямых экспериментальных данных еще мало.

Показано², что в случае скалярного лагранжиана все инварианты и антиинварианты преобразования Фирца выражаются в виде

$$\sum_{i=1}^{16} \chi_i^{(I)} \langle \bar{\psi}_1 \Gamma_i \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 \Gamma_i \psi_4 \rangle. \quad (7)$$

$\chi_i^{(h)}$ являются здесь элементами одномерных представлений группы Дирака

$$\Gamma_i \leftrightarrow \chi_i^{(h)}, \quad k=1, 2, \dots, 16. \quad (8)$$

Мы рассмотрели эту проблему в случае смешанного лагранжиана (1).

Так как $\chi_i^{(h)} = \chi_h^{(i)}$ ³, то лагранжиан $V - A$ -взаимодействия можно выразить в виде

$$\mathcal{L}_{(V-A)} = C \sum_{i \in V} K^{(i)} \langle \bar{\psi}_1 (1 - \gamma^5) \gamma^i \psi_2 \rangle \langle \bar{\psi}_3 (1 - \gamma^5) \gamma^i \psi_4 \rangle, \quad (9)$$

где

$$K^{(i)} = \sum_{k \in V} [(1 - \chi_0^{(i)}) \chi_k^{(i)}] [(1 - \chi_0^{(i)}) \chi_k^{(i)}]; \quad (10)$$

здесь $\chi^5 \leftrightarrow \chi_0^{(i)}$ является элементом i -го одномерного представления, соответствующим матрице γ^6 .

Лагранжиан $V - A$ -взаимодействия является единственным лагранжианом, который является симметричным по отношению к четырехмерному и одномерным представлениям алгебры Дирака.

Материалы доклада будут опубликованы в Изв. АН ЭССР.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. P i e t s c h m a n n, *Formulae and Results in Weak Interactions*, Wien — New York, 1974 (*Acta Physica Austriaca*, Suppl. 12).
2. E. de V r i e s, A. Y. v a n Z a n t e n, *Comm. Math. Phys.* 17, 322 (1970).
3. X. Ы й г л а н е, Представления группы Дирака. Препринт FI-39, Тарту, 1975.

537.226(048)

Н. Н. Кристофель, П. И. Консин. Вибронная теория сегнетоэлектричества. Электрон-фононное (вибронное) взаимодействие играет существенную роль для многих физических процессов в твердых телах и служит причиной ряда ярких эффектов. К настоящему времени, видимо, ясно, что электрон-фононное взаимодействие служит также микроскопической причиной возникновения сегнетоэлектрических свойств в диэлектрических и полупроводниковых кристаллах с фазовыми переходами типа смещения. Это заключение следует из относительно новой теории, так называемой вибронной теории сегнетоэлектричества, которая была разработана в СССР авторами настоящего сообщения (см., например, ¹⁻³) и Берсукером с сотрудниками (см., например, ^{4,5}).

Несмотря на большое число теоретических работ, микроскопические причины возникновения сегнетоэлектричества оставались долгое время неясными. Теория Гинзбурга — Андерсона — Кохрена показала наличие в сегнетоэлектриках мягкой фононной моды, по которой кристалл теряет в точке фазового перехода динамическую стабильность. Микроскопическую причину возникновения мягкой моды видели в компенсации определенных вкладов сил межзонного взаимодействия в частоту активной моды. Дальнейшие улучшения динамической теории в направлении более последовательного учета фононного ангармонизма ⁶ просто предполагали наличие мнимой затравочной частоты активной моды.

Вопрос об определяющей роли вибронного взаимодействия для симметрии многоядерного остова физической системы впервые возник в связи с теоремой Яна — Теллера ⁷. В кристаллофизике эта идея была в первую очередь использована для объяснения анизотропных свойств примесных центров (см., например, ^{8,9}). Вибронное взаимодействие при наличии электронного орбитального вырождения (или квазивырождения) приводит здесь как бы к локальным фазовым переходам. Далее рядом авторов ¹⁰⁻¹⁴ был поставлен вопрос о рассмотрении ян-теллеровских ситуаций на зонных состояниях кристаллов. Спонтанная электрическая поляризация должна возникать по нечетным предельным оптическим колебаниям кристалла. Поэтому причину сегнетоэлектрического перехода было естественно искать в смешивании электронных зон противоположной четности активными нечетными колебаниями. Эта идея привела к созданию вибронной теории сегнетоэлектричества.

Сегнетоэлектрик описывается в такой теории гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_\phi + \mathcal{H}_{a,\phi} + \mathcal{H}_a, \quad (1)$$

содержащим оператор энергии электронов \mathcal{H}_a валентной зоны и зоны проводимости, гармонический фононный гамильтониан \mathcal{H}_ϕ , электрон-фононное взаимодействие $\mathcal{H}_{a,\phi}$ и член, описывающий собственный фононный ангармонизм \mathcal{H}_a .

Отвлекаясь на время от роли \mathcal{H}_a (это оправдано для узкощельных систем), учитывая существенную перенормировку электронного энергетического спектра вибронным взаимодействием $\mathcal{H}_{a,\phi}$, можно активную в фазовом переходе часть свободной энергии системы записать в виде

$$F(T, y_0) = -k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 2 \left[1 + \operatorname{ch} \left(\frac{1}{2k_B T} \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \frac{4V^2}{N} y_0^2} \right) \right] \right\} + \frac{M\omega_0^2}{2} y_0^2; \quad (2)$$

здесь V — константа межзонного вибронного взаимодействия, y_q — нормальные координаты активной ветви колебаний, $\Delta_{\mathbf{k}} = \epsilon_2(\mathbf{k}) - \epsilon_1(\mathbf{k})$, N — число элементарных ячеек.

Из (2) видно, что вибронное взаимодействие вносит в систему дополнительный (вибронный) ангармонизм. Конкретное вычисление (2) требует знания плотностей «затравочных» электронных состояний кристалла. При узких зонах можно ввести эффективную щель $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}_k$. Низкосимметричное искажение решетки появляется при условии, что уравнение $\partial F(T, y_0)/\partial y_0|_{y_{00}} = 0$ обладает решением $y_{00}^2 > 0$ при $T > 0$. Такое решение с обычным для фазового перехода 2-го рода поведением параметра порядка $y_{00}(T)$ имеет место ниже температуры

$$k_B T_c = \frac{\bar{\Delta}}{4} (\text{Arcth } \tau)^{-1}, \quad (3)$$

если выполняется критерий

$$\tau = \frac{2V^2}{M\omega_0^2\bar{\Delta}} > 1. \quad (4)$$

Выше T_c стабильна высокосимметричная фаза, где $y_{00} = 0$. Согласно (4) возникновению фазового перехода способствуют сильное межзонное вибронное взаимодействие и значительная затравочная деформируемость кристалла по активной моде при малой средней энергии $\bar{\Delta}$ затравочных электронных возбуждений. Аналогичные заключения получаются и при последовательном учете дисперсии электронных зон¹⁵⁻¹⁷.

Физически в системе происходит следующее. Вибронное взаимодействие понижает энергию электронов нижней и повышает энергию электронов верхней зоны. Если результирующее понижение энергии электронной подсистемы больше, чем затравочное значение потенциальной энергии решетки на активные колебания, последние становятся мягкими. Возникает спонтанное искажение решетки путем «вымораживания» отвечающих мягкой моде сдвигов ионов в решетку. С ростом температуры переборс электронов в верхнюю зону приведет при $T = T_c$ к компенсации указанных вкладов и кристалл совершит переход в высокосимметричную фазу. Расчет сложных ветвей электрон-фононных возбуждений системы¹ показывает существенную температурно-зависимую вибронную перенормировку частоты активной моды. Например, квадрат частоты мягкой моды в высокосимметричной фазе для случая узких зон дается формулой

$$\Omega_c^2 = \omega_0^2 + \frac{2V^2}{M\bar{\Delta}} (f_2 - f_1), \quad (5)$$

где $f_{2,1}$ — фермиевские числа заполнения состояний с энергиями $\pm \frac{\bar{\Delta}}{2}$. Поскольку $f_2 \ll f_1$, Ω_c понижается с температурой и обращается в нуль при T_c . Если учесть вырожденность активных электронных зон и колебаний, система может пройти последовательность низкосимметричных фаз различной симметрии, в которых частота мягкой моды расщеплена.

Активное вибронное взаимодействие приводит также к дополнительной температурной зависимости запрещенной щели электронного спектра¹⁸. Внешние воздействия, изменяющие последнюю (например, магнитное поле), должны оказывать влияние и на сегнетоэлектрические характеристики системы¹⁵. В пределе $\Delta \rightarrow 0$ система является полуметаллом. Можно показать, что в этом случае возможен сегнетоэлектрический фазовый переход полуметалл — диэлектрик, так как в точке T_c межзонное вибронное взаимодействие индуцирует в системе отличную от нуля энергетическую щель^{16,17}. Полупроводниковый вариант вибронной теории объясняет свойства мягкой моды и диэлектрической проницаемости систем типа $n\text{-Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ ¹⁹⁻²¹.

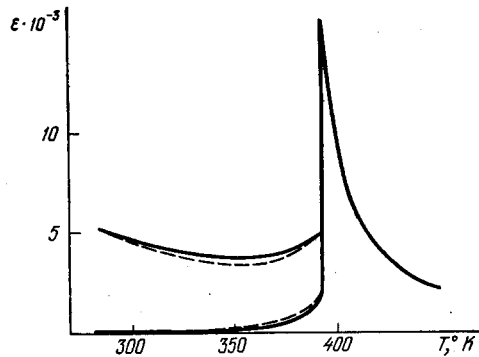


Рис. 1. Зависимость диэлектрической постоянной BaTiO_3 от температуры.

Нижняя кривая в тетрагональной фазе отвечает направлению спонтанной поляризации. Сплошные кривые — теория, штриховые — эксперимент.

Однако наиболее известный класс сегнетоэлектриков с переходом типа смещения представляют собой диэлектрические кристаллы типа BaTiO_3 . Тепловых переборсов электронов из валентной зоны в зону проводимости здесь нет. Теперь следует в полную меру учесть собственно фононные

ангармонические взаимодействия в решетке. Но вибронное взаимодействие продолжает и здесь играть роль первостепенной важности, обеспечивая минимое значение начальной частоты активной колебательной моды²².

Ангармонические взаимодействия действуют в сторону стабилизации высокосимметричной фазы (как и внутризонные процессы рассеяния) и приводят к тому, что фазовый переход становится переходом 1-го рода.

Для BaTiO_3 были полуэмпирически определены параметры соответствующего варианта вибронной теории²². На рис. 1 и 2 показаны теоретические и экспериментальные температурные зависимости диэлектрической восприимчивости и электронной энергетической щели. Согласно теории с экспериментом хорошее. Константа межзонного вибронного взаимодействия получилась нормальной для диэлектрика величины, но затравочная частота активного колебания оказалась аномально малой. Это существенно для возможности выполнения необходимого критерия вибронного фазового перехода $\tau > 1$. Таким образом, микроскопические причины наличия сегнетоэлектрических свойств у класса кристаллов типа BaTiO_3 заключаются, в грубых чертах, в динамической нестабильности кристалла, наведенной электрон-фононным взаимодействием в условиях высокой деформируемости кристалла по определенной колебательной моде.

Вибронная теория дает естественное объяснение влиянию концентрации дополнительных носителей на сегнетоэлектрические свойства системы. Используя найденные параметры теории для BaTiO_3 , было дано количественное объяснение понижению точки Кюри при освещении кристалла²³. Было также изучено влияние носителей примесного происхождения на сегнетоэлектрические свойства системы²⁴. Особенно заметным это влияние может быть в полупроводниках²⁵.

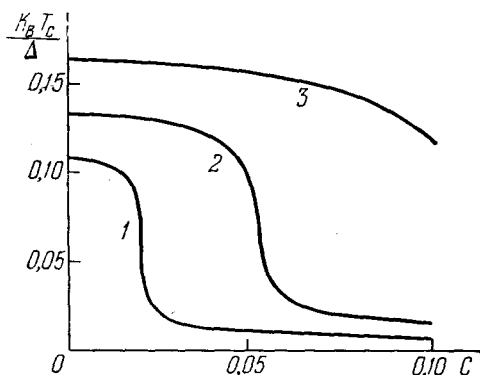


Рис. 3. Зависимость температуры Кюри сегнетоэлектрика — полупроводника от концентрации акцепторов c (отстоящих на 0,005 эв от границы зоны, $\bar{\Delta} = 0,1 \text{ эв}$) при $\tau = 1,02$ (1), 1,05 (2) и 1,1 — (3).

Разработана также идейно достаточно близкая к вибронной теории динамическая теория сегнетоэлектриков с водородными связями, основанная на протон-фононных, протон-протонных и фонон-фононных взаимодействиях^{27,28}.

В последнее время становится актуальным изучение соотношения сегнетоэлектричества (и вообще структурных переходов) с различными электронными упорядочениями, в частности сверхпроводимостью. Вибронная теория открывает в этом направлении, по-видимому, новые перспективы.

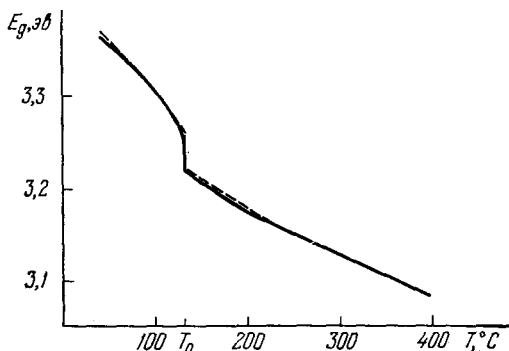


Рис. 2. Температурная зависимость запрещенной щели BaTiO_3 при коэффициенте поглощения 3000 см^{-1} .

Сплошная кривая — теория, штриховая — эксперимент.

На рис. 3 иллюстрируется зависимость T_c от концентрации акцепторов при различных τ . Примеси влияют также на форму температурных зависимостей искажения решетки и частоты мягкой моды. При достаточной концентрации примесей, когда образуется примесная зона, ее вибронное смешивание с зоной основания может также привести к возникновению сегнетоэлектрического упорядочения. На основании вибронной теории была разработана теория сегнетоэлектрических твердых растворов $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$ ²⁶.

В итоге можно констатировать, что вибронная теория объясняет с единых позиций основные закономерности, известные для сегнетоэлектриков с переходом типа смещения.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Kristoffel, P. Konsin, Phys. Stat. Sol. 28, 731 (1968).
2. Н. Н. Кристофель, П. И. Консин, Титанат бария, М., «Наука», 1973, стр. 41.
3. N. Kristoffel, P. Konsin, Ferroelectrics 6, 3 (1973).
4. И. Б. Берсукер, Б. Г. Вехтер, ФТТ 9, 2652 (1967).
5. И. Б. Берсукер, Б. Г. Вехтер, И. Я. Огурцов, УФН 116, 605 (1975).
6. В. Г. Вакс, Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М., «Наука», 1973.
7. H. Jahn, E. Teller, Proc. Roy. Soc. A161, 220 (1937).
8. Н. Н. Кристофель, Теория примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах, М., «Наука», 1974.
9. И. Б. Берсукер, Строение и свойства координационных соединений, М., «Химия», 1971.
10. Н. Н. Кристофель, ФТТ 6, 3266 (1964).
11. K. Sinha, A. Sinha, Ind. J. Pure Appl. Phys. 2, 91 (1964).
12. J. Birman, Phys. Rev. 125, 1959 (1962).
13. I. B. Bersuker, Phys. Lett. 20, 589 (1966).
14. N. N. Kristoffel, P. I. Konsin, Phys. Stat. Sol. 21, K39 (1967).
15. П. Консин, Н. Кристофель, Изв. АН ЭССР, сер. физ.-матем. 20, 371 (1974).
16. Н. Н. Кристофель, П. И. Консин, Препринт ОИЯИ Р17-9268, Дубна, 1975.
17. П. И. Консин, ФТТ 18, 701 (1976).
18. П. Консин, Н. Кристофель, Изв. АН ЭССР, сер. физ.-матем. 22, 173 (1973).
19. A. Benyon, A. P. C. Grassie, J. Vac. Sci. and Technol. 10, 678 (1974).
20. H. Kawamura, S. Katayama, S. Takano, S. Hotta, Sol. State Comm. 14, 259 (1974).
21. H. Kawamura, K. Murase, S. Nishikawa, S. Nishi, S. Katayama, ibid. 17, 341 (1975).
22. Н. Н. Кристофель, П. И. Консин, ФТТ 13, 2513 (1971).
23. Н. Н. Кристофель, П. И. Консин, Кристаллография 17, 712 (1972).
24. П. И. Консин, Н. Н. Кристофель, ФТТ 13, 3513 (1971).
25. Н. Н. Кристофель, Препринт FI-41, Тарту, 1975.
26. П. И. Консин, ФТТ 16, 2709 (1974).
27. П. И. Консин, ibid., стр. 2337; 17, 2374 (1975).
28. П. И. Консин, Н. Н. Кристофель, Изв. АН СССР, сер. физ. 39, 650 (1975).

535.373.3(048)

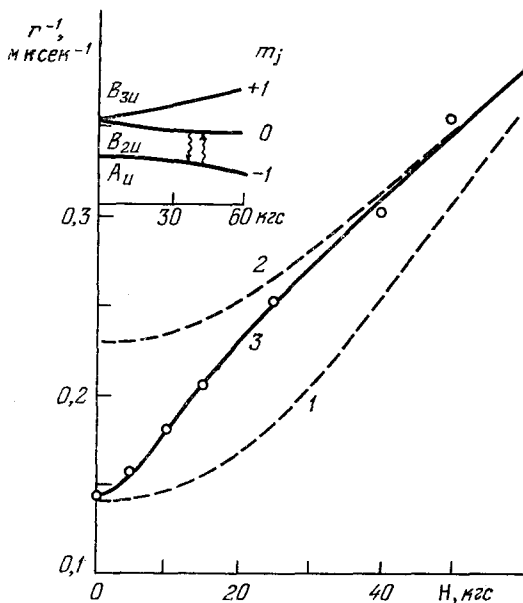
Г. Г. Лийдя. Затухание люминесценции триплетного состояния автолокализованного экситона (квазимолекулы X_2^-) щелочногалогидных кристаллов в магнитном поле. Возбужденная квазимолекула X_2^- , где $X = I, Br, Cl$ или F , возникает в ШГК либо при релаксации экситона, либо в результате рекомбинации электрона с V_R -центром. Каблер установил¹, что широкая ($\sim 0,4$ эв) длинноволновая полоса свечения чистых ШГК испускается квазимолекулами с триплетного состояния $^3\Sigma_u^-$. Переход $^3\Sigma_u^- \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ разрешен благодаря примешиванию синглета $^1\Pi_u$, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием. В поле местной симметрии D_{2h} триплет расщепляется на пару почти вырожденных излучательных уровней b (B_{2u}, B_{3u}) и метастабильный a (A_u). Мы установили, что затухание люминесценции при низкой температуре состоит из двух экспоненциальных компонент², изучение температурной зависимости которых³⁻⁶ позволило определить вероятности излучательных переходов p_{bg} и p_{ag} в основное состояние g , вероятности безызлучательных переходов p_{ba} и p_{ab} между компонентами триплета и величину энергетического расщепления E_{ab} . При низких температурах $kT \ll E_{ab}$ безызлучательные переходы однофононные, $p_{ba} = p_0(1 + \bar{n})$, $p_{ab} = 2p_0\bar{n}$, где $\bar{n} = [\exp(E_{ab}/kT) - 1]^{-1}$. В таблице приведены некоторые параметры для KI и KBr.

Кристалл	E_{ab}/h , °K	p_{bg} , сек ⁻¹	p_{ag} , сек ⁻¹	p_0 , сек ⁻¹
KI	7,9	$0,88 \cdot 10^6$	$< 10^4$	$0,98 \cdot 10^6$
KBr	0,35	$1,27 \cdot 10^4$	$0,17 \cdot 10^4$	$7 \cdot 10^2$

Магнитное поле H смешивает компоненты триплета и смещает соответствующие уровни. Вероятности электронных переходов изменяются, и это отражается в кинетике люминесценции, которая была изучена Каблером^{7,8} и нами^{9,10}. Изменение вероятности излучательных переходов сводится к смешиванию волновых функций (изменение энергии перехода $\Delta E_{bg} \approx g\mu_B H \ll E_{bg}$ практически никакого вклада не дает). Изменение вероятностей безизлучательных переходов сводится к двум эффектам: 1) смещению уровней, которое учитывается фактором $p_{ij} \sim E_{ij}^3 (1 + n)$ и 2) изменению характера электронно-колебательного взаимодействия^{9,10}. Обычно учитывают только первый эффект (см., например, ^{7,8}).

В случае К1, где при 4,2 °К преобладают однофононные безызлучательные переходы ($kT < E_{ab}$), второй эффект сказывается в кинетике затухания. При $H = 0$ переходы $A_u \leftrightarrow V_{2u}, V_{3u}$ индуцируются колебаниями V_{2g} и V_{3g} , а полносимметричные колебания A_g , характеризующиеся большой константой связи, вклада в p_0 не дают. При $H \neq 0$ колебания A_g приводят к быстрому возрастанию вероятностей безызлучательных переходов между компонентами триплета, которые содержат возникающие и возрастающие с магнитным полем части одинаковой симметрии. На рисунке кривая 3, которая аппроксимирует экспериментальную зависимость времени затухания длительной компоненты свечения К1 от H , плавно переходит с кривой 1, вычисленной без учета эффекта 2), на кривую 2, вычисленную для термически равновесного случая ($p_{ab}, p_{ba} \gg p_{ag}, p_{bg}$). Единственный параметр, определенный из эксперимента (разность диагональных элементов матрицы возмущения $(\partial E_{ij} / \partial Q_{ij}) Q_{ij}$, где Q_{ij} — местная координата колебания), хорошо описывал затухание двух компонент, а также разные ориентации поля¹⁰.

В случае КВг, где $E_{ab}/k = 0,35$ °К и даже при 2 °К преобладают многофононные переходы, затухание в магнитном поле описывается на основе простой теории (не учитывающей эффект (2))¹⁰.



Зависимость времени затухания триплетной люминесценции К1 от напряженности магнитного поля $\vec{H} \parallel [001]$ при 4,2 °К.

Значки — эксперимент для медленной компоненты затухания. Смысл теоретических кривых (1—3) пояснен в тексте. В верхнем углу показано расщепление $^3\Sigma_u^+$ -терма для молекул I_2^+ , ось которых составляет угол 45° к H.

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Н. Каблер, D. A. Patterson, Phys. Rev. Lett. 19, 652 (1967).
2. Р. А. Кинк, Г. Г. Лийдья, Т. А. Соовик, Опт. и спектр. 30, 279 (1974).
3. П. А. Каск, Р. А. Кинк, Г. Г. Лийдья, Т. А. Соовик, ibid. 37, 942 (1974).
4. П. А. Каск, Р. А. Кинк, Г. Г. Лийдья, Т. А. Соовик, Изв. АН СССР, сер. физ. 38, 1264 (1974).
5. П. Каск, Т. Соовик, Изв. АН ЭССР, сер. физ.-матем. 23, 291 (1974).
6. J. V. Fischbach, D. Fröhlich, M. N. Kabler, J. Luminescence 6, 29 (1973).
7. М. Н. Каблер, М. Дж. Марроне, В. Б. Фаулер, Изв. АН СССР, сер. физ. 37, 341 (1973).
8. W. B. Fowler, M. J. Marrone, M. N. Kabler, Phys. Rev. B8, 5909 (1973).
9. P. Kask, V. Mikkelsoo, T. Soovik, ENSV TA Toimetised, füüs.-mat. 24, 230 (1975).
10. П. А. Каск, Г. Г. Лийдья, В. Т. Михкельсоо, Т. А. Соовик, Тр. ИФ АН ЭССР 45, 5 (1976).

Э. Т. Липпмаа. Магнитный резонанс редких ядер высокого разрешения в твердых телах. В последние годы быстро развиваются различные методы магнитного резонанса высокого разрешения в твердых телах, в основном на распространенных (^1H , ^{19}F), а также на редких (^{13}C , ^{29}Si) ядрах. Классические методы ядерной индукции дают в отсутствие быстрого молекулярного движения лишь неразрешенные спектры, в которых естественная ширина линий обычно

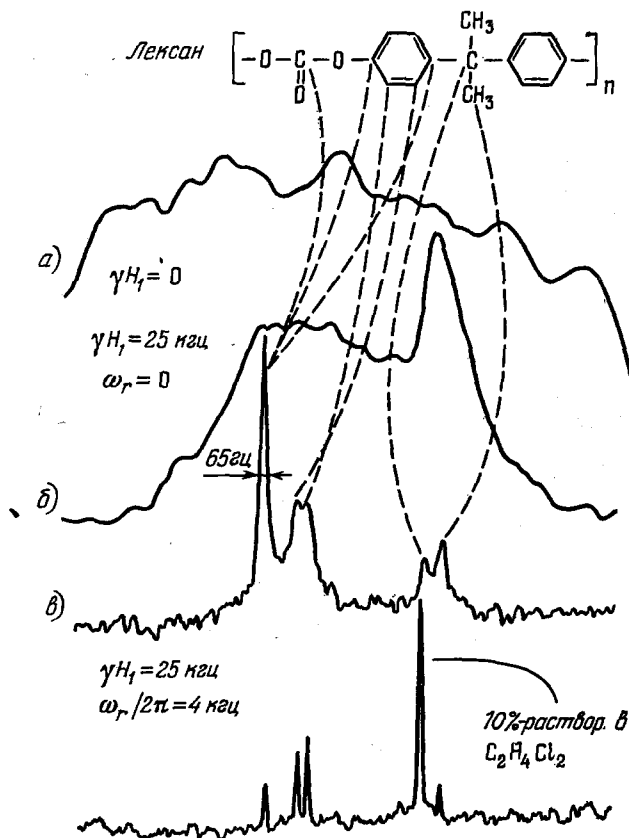


Рис. 1.

намного превышает весь диапазон химических сдвигов исследуемого ядра, а очень длинные времена спин-решеточной релаксации ведут к сильному уменьшению отношения сигнал/шум.

Сочетание таких характерных для современной молекулярной спектроскопии методов, как применение нелинейных эффектов, возникающих под влиянием сильных когерентных возмущающих электромагнитных полей, параметрической модуляции, а также накопления и преобразования на мини-ЭВМ всего несущего информацию сигнала, позволяет регистрировать спектры высокого разрешения от твердых образцов и разделять даже практически полностью перекрывающиеся линии. На рис. 1 показаны спектры углерода ^{13}C твердого полимера — поликарбоната (лексан). Спектр рис. 1, а снят в условиях монорезонанса путем фурье-преобразования сигнала свободной прецессии ядерной намагниченности в x, y -плоскости после выведения ее резонансным радиочастотным импульсом $H_{1x}^{13\text{C}}$ из равновесного состояния вдоль оси z . Этот спектр состоит из наложения семи линий очень малой интенсивности, причем собственная ширина каждой из них превышает ширину всего спектра и вся видимая «структура» вызвана лишь термическим шумом спектрометра. Спектр рис. 1, б зарегистрирован по той же методике, но в условиях развязки ядер ^{13}C от ^1H под воздействием на последние резонансного высокочастотного поля большой амплитуды ($\gamma H_{1x}^{1\text{H}} > 2/T_2$, $\Delta\delta_{1\text{H}}$) и передачи ядерной намагниченности от распространенных ядер ^1H к редким ядрам ^{13}C в условиях принудительной прецессии (spin-lock) с выполнением условия Хартмана —

Хана¹ для кросс-релаксации во вращающейся системе координат ($\gamma_{\text{H}} \text{H}_{1x}^{\text{H}} = \gamma_{\text{C}} \text{H}_{1x}^{\text{C}}$). При этом происходит выравнивание спиновых температур ядер ^1H и ^{13}C с сильным ростом намагниченности (и полезного сигнала) последних и усредняются до нуля тензор диполь-дипольной связи между ядрами ^1H и ^{13}C ($\overline{D}_{\text{CH}} = 0$, аналогично жидкостям как при быстром стохастическом движении молекул²) и тензор спин-спиновой связи между ядрами ^1H и ^{13}C ($J_{\text{CH}} = 0$), как в опытах по гетероядерному двойному резонансу³.

Развязку ядерных спинов с полным коллапсом соответствующих спиновых мультиплетов пока удается реализовать только в ЯМР, однако многие эффекты, возникающие при меньших амплитудах импульсного возмущающего высокочастотного поля (появление новых линий в спектрах, расщепление и изменение формы связанных

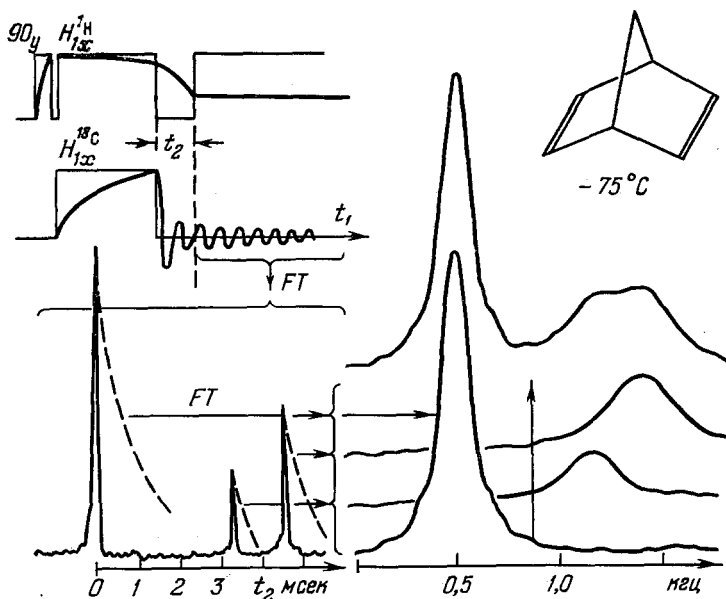


Рис. 2.

с возмущаемым переходом линий, спиновое эхо), имеют свои аналоги в других видах молекулярной спектроскопии, в том числе и в оптике. В условиях гетероядерной развязки и передачи ядерной поляризации от распространенных ядер к редким не усредняются тензоры химического сдвига σ_i последних и сохраняется сильное анизотропное уширение соответствующих линий за счет анизотропии их химических сдвигов. В случае простых соединений последнее обстоятельство является источником полезной дополнительной информации об электронной структуре и динамике молекулярного движения в твердых телах, однако в случае сложных молекул и полимеров это ведет к появлению в спектрах неоднородно уширенных и совершенно неинтерпретируемых областей (рис. 1, б).

Характерное для жидкостей усреднение тензора химического сдвига $\overline{\sigma}_{izz} = 1/3 \text{Sp } \sigma_i$, а также усреднение гомоядерного диполь-дипольного взаимодействия может быть достигнуто механическим вращением всего образца под углом $\beta = 54^\circ 44'$ к направлению постоянного магнитного поля. Из теории Эндрю⁴ следует, что при очень быстром вращении образца ($\omega_r > 2/T_2$, $|\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp}|$) оператор гомо- и гетероядерного диполь-дипольного взаимодействия умножается на $(3\cos^2 \beta - 1)/2$ и химические сдвиги усредняются в $(1/3) \text{Sp } \sigma_i$.

Комбинация необходимой сложной последовательности мощных высокочастотных импульсов с быстрым (от 2 до 5 кгц) безвибрационным вращением неметаллического образца, и тем более измерение очень слабого сигнала свободной прецессии от ядер ^{13}C

при естественном содержании этого изотопа (1,1%) представляют сложную, но разрешимую задачу. Аналитически полезный спектр высокополимерного поликарбоната лексана с разрешенными сигналами от большинства магнитно неэквивалентных углеродных атомов, показан на рис. 1, *в*. Спектр получен от твердого образца этой пластмассы за 23 минуты на частоте 10 *мгц*, с применением ЭВМ типа NIS-1085 для накопления и фурье-преобразования измеряемого сигнала, а также для автоматического генерирования сложных последовательностей высокочастотных импульсов с помощью входного-выходного устройства типа NIS-293.

В приведенных на рис. 1 спектрах отсутствует информация о форме и релаксации отдельных линий. Почти парадоксально, что и эта информация, несмотря на практически полное перекрытие линий неизвестной формы, все же оказывается доступной. Схема соответствующего эксперимента с применением двойного фурье-преобразования (вначале по t_1 в условиях развязки спинов ядер ^{13}C от ^1H и соответственно с получением спектра ^{13}C высокого разрешения, где отдельные узкие линии выступают в роли маркеров, и затем по t_2 , что соответствует протеканию релаксации поперечной намагниченности ядерных спинов ^{13}C без воздействия сильных возмущающих полей, и поэтому дает после фурье-преобразования форму каждой из линий в спектре монорезонанса в отдельности) показана на рис. 2. Формы линий и соответствующие переходные процессы ядерной релаксации имеют характер, промежуточный между лоренцевым и гауссовым. Эффект может быть вызван синхронизированным движением молекул в твердом норборнадене при -75°C и ниже.

Во всех вышеописанных экспериментах для получения спектра ЯМР применялось фурье-преобразование сигнала свободной прецессии ядерной намагниченности после импульсного возбуждения всей исследуемой части спиновой системы твердого образца. Это не всегда возможно (например, в оптике) или нецелесообразно, и в случае слабых и широких линий квадрупольных ядер (^{17}O) наилучшее значение отношения сигнал/шум достигается при возбуждении исследуемой системы белым «шумом» в виде псевдослучайной последовательности импульсов, генерированной сдвиговым регистром с обратными связями, и преобразованием Адамара соответствующего выходного сигнала. При этом первоначально образуется функция перекрестной корреляции входного и выходного шумов, а желаемый спектр получают фурье-преобразованием последнего.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. R. Hartmann, E. L. Hahn, Phys. Rev. 128, 2042 (1962).
2. A. Pines, M. G. Gibby, J. S. Waugh, J. Chem. Phys. 59, 569 (1973).
3. Э. Т. Липпмаа, Ж. структ. хим. 8, 717 (1967).
4. E. R. Andrew, R. G. Eades, Disc. Farad. Soc. 34, 38 (1962).
5. M. Alla, E. Lippmaa, Chem. Phys. Lett. 37, 260 (1976).