

соответствующей равновесной конфигурации. С помощью такой диаграммы можно легко обсудить упомянутые выше переходы.

Для лучшего понимания модели конфигурационной координаты набросаем ниже ход мыслей, приводящий к рис. 30.

Исходим из оператора Гамильтона для системы электрон + решетка

$$\hat{H} = T_e + T_l + V(r, R). \quad (2.88)$$

T_e и T_l — операторы кинетической энергии электронов и ионов решетки соответственно. $V(r, R)$ — энергия взаимодействия, в которой

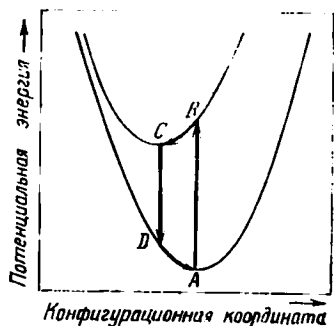


Рис. 30. Модель конфигурационной координаты для описания оптического перехода в дефектах: AB — возбуждение дефекта, BC — релаксации решетки (установление новой равновесной конфигурации), CD — рекомбинация электрона ($E_{CD} < E_{AB}$), DA — возвращение решетки в исходную конфигурацию.

координаты электронов объединены в r , а координаты ионов решетки — в R .

Для того чтобы расцепить эти две системы, представим волновую функцию в виде произведения: $\Psi = \psi(r, R_0)\phi(R)$. Здесь подразумевается, что ψ должно являться решением уравнения Шредингера для основного состояния электрона при фиксированной конфигурации решетки R_0 (положение равновесия ионов решетки):

$$H_e \psi = [T_e + V(r, R_0)] \psi = E(R_0) \psi. \quad (2.89)$$

Оставшаяся часть гамильтониана описывает колебания решетки. Если выразить отклонения ионов решетки $R - R_0$ через (действительные) нормальные координаты, можно записать для (2.88)

$$H = H_e + \frac{1}{2} \sum_k (P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2). \quad (2.90)$$

Можно рассматривать часть

$$E(R) = E(R_0) + \frac{1}{2} \sum_k \omega_k^2 Q_k^2 \quad (2.91)$$

как потенциальную энергию системы в основном состоянии. Уравнение (2.91) описывает нижнюю кривую на рис. 30, на котором E нанесена как функция одной из Q_k .