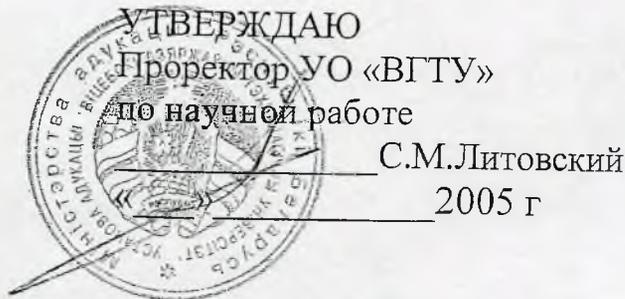


Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования «Витебский государственный технологический  
университет»

УДК 548

№ ГР 20051154

Инв № \_\_\_\_\_



# ОТЧЕТ

О научно-исследовательской работе  
*«Разработка алгоритма определения параметров интенсивности  
актиноидов по данным межконфигурационного взаимодействия»*  
2005 Г/Б - 332

(Заключительный)

Научный руководитель

А.А.Корниенко

Начальник НИС

С.А.Беликов

Витебск, 2005г

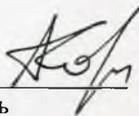
Библиотека ВГТУ



БІБЛІАТЭКА  
УА "ВІЦЕБСКІ ДЗЯРЖАЎНЫ  
ТЭХНАЛАГІЧНЫ УНІВЕРСІТЭТ"  
інв. № \_\_\_\_\_

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

**Научный руководитель**  
доктор физ.-мат наук,  
профессор, г.н.с

23.12.05 

дата, подпись

Корниенко Алексей  
Александрович

*Введение, заключение*

### Исполнители:

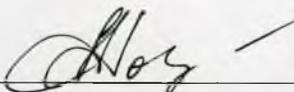
кандидат физ.-мат наук,  
доцент, с.н.с.



дата, подпись

Дунина Елена  
Брониславовна  
*раздел 1-2*

аспирант, м.н.с.



дата, подпись

Фомичёва Людмила  
Александровна  
*раздел 3*

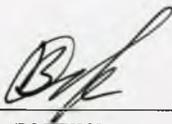
Инженер



дата, подпись

Сапежинский Валерий  
Степанович  
*раздел 4*

Нормоконтролёр



дата, подпись

Сапежинский Валерий  
Степанович

## РЕФЕРАТ

Отчет 31с., 8 табл., 26 источников.

УРАН, АМЕРИЦИЙ, ЛАЗЕРНЫЕ КРИСТАЛЛЫ, КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ПОЛЕ, ИНТЕНСИВНОСТИ.

Объектом исследования являются лазерные кристаллы и стекла, активированные четырехвалентным ураном и трехвалентным америцием.

Цель работы исследовать влияние межконфигурационного взаимодействия на интенсивности межмультиплетных переходов и штарковское расщепление мультиплетов лазерных материалов, активированных ионами  $U^{4+}$  и  $Am^{3+}$

В процессе работы проводились только теоретическое исследование и компьютерное моделирование спектроскопических свойств лазерных материалов.

В результате исследования впервые было выполнено описание абсорбционных переходов и определены параметры интенсивности иона  $U^{4+}$  в приближении промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия. Установлено, что возбужденные конфигурации дают значительный вклад в интенсивности межмультиплетных переходов.

Впервые для иона  $Am^{3+}$  определены параметры ковалентности и параметры кристаллического поля нечетной симметрии на основе анализа штарковской структуры мультиплетов.

Степень внедрения разработанные алгоритмы и компьютерные программы могут применяться другими исследователями для моделирования и предсказания оптических свойств лазерных материалов.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	5
ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ .....	6
1. Вычисление волновых функций и энергии мультиплетов $\text{Am}^{3+}$ и $\text{U}^{4+}$ в приближении свободного иона .....	6
2. Матричные элементы неприводимых единичных тензорных операторов .....	8
3. Расчет параметров интенсивности иона $\text{U}^{4+}$ .....	9
3.1. Основные формулы .....	9
3.2. Сравнение с экспериментом .....	11
4. Расчет штарковской структуры иона $\text{Am}^{3+}$ в $\text{LaCl}_3$ и определение параметров нечетного кристаллического поля и параметров ковалентности .....	14
4.1. Вводные замечания .....	14
4.2. Основные формулы для учета межконфигурационного взаимодействия .....	15
4.3. Определение нечетных параметров кристаллического поля и параметров ковалентности. ....	18
4.4. Обсуждение результатов и выводы .....	19
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	27
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	28

## ВВЕДЕНИЕ

С целью поиска новых лазерных материалов были синтезированы кристаллы, активированные ионами  $U^{4+}$  и  $Am^{3+}$  [1,2]. У кристаллов с примесью  $U^{4+}(5f^2)$  более широкие спектральные линии и интенсивности межмультиплетных переходов на два порядка больше, чем у иона  $Pr^{3+}(4f^2)$ .

В теоретическом плане кристаллы с примесью ионов  $U^{4+}$  интересны тем, что применение приближения Джадда-Офельта [3,4] для описания интенсивностей межмультиплетных электрических дипольных переходов менее успешно, чем к материалам с примесью  $Ln^{3+}$  ионов [2,5]. Возможно, это обусловлено более сильным межконфигурационным взаимодействием.

Поскольку всестороннее исследование этих эффектов отсутствует, представляется актуальным выполнить сравнительный анализ применимости различных приближений для учета влияния межконфигурационного взаимодействия на интенсивности  $5f-5f$  переходов и на штарковскую структуру мультиплетов. На основе такого анализа можно разработать алгоритм определения параметров интенсивности по данным межконфигурационного взаимодействия. Такой алгоритм имел бы практическое применение, так как позволит предсказывать параметры интенсивности на основе анализа штарковской структуры мультиплетов.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Brundage R.T., Svatos M.M., Grinbergs R. Transition rates and Judd-Ofelt intensity parameters of tripositive americium in a fluorozirconate glass // J. Chem. Phys. 1991 V.95, №11, P 7933 - 7937
2. Auzel F., Hubert S., Delamoye P Absolute oscillator strengths of 5f-5f transitions of  $U^{4+}$  in  $ThBr_4$  and in hydrobromic acid solutions // J.Lum. 1982. V.26, P 251 - 262.
- 3 Judd B.R. Optical Absorption Intensities of Rare-Earth Ions // Phys.Rev. 1962. V 127, N3, P 750 - 761
4. Ofelt G S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions // J.Chem.Phys. 1962. V.37, N3, P 511 - 520.
- 5 Дунина Е.Б., Корниенко А.А. Описание интенсивностей абсорбционных переходов урана с учетом межконфигурационного взаимодействия // Квантовая электроника: Материалы V Междунар. науч.-техн. конф. Мн.. БГУ, 2004. С. 130
6. Корниенко А.А. Теория спектров редкоземельных ионов в кристаллах // Витебск. Изд-во УО «ВГУ им. П.М. Машерова», 2003, 128 С.
- 7 Корниенко А.А., Каминский А.А., Дунина Е.Б. Влияние межконфигурационного взаимодействия на кристаллическое поле  $Ln^{3+}$  - ионов // ЖЭТФ 1999 Т 116, Вып. 6, С. 2087
8. Корниенко А.А., Дунина Е.Б. Определение параметров интенсивности по тонким деталям штарковской структуры энергетического спектра иона  $Tm^{3+}$  в  $Y_3Al_5O_{12}$  //Опт и спектр. 2004. Т 97, № 1, С. 75 - 82.
- 9 Корниенко А.А., Дунина Е.Б. Зависимость штарковской структуры от энергии мультиплетов // Письма в ЖЭТФ 1994. Т.59, № 6, С. 385
- 10.Kornienko A.A., Kaminski A.A., Dunina E.B. Dependence of the Line Strength of f-f transitions on the Manifold Energy I. Projector on the Basis of Nonorthogonal Functions // Phys. Stat. Sol. (b). 1990 V 157, № 1, P 267
- 11.Дунина Е.Б., Каминский А.А., Корниенко А.А., Курбанов К., Пухов К.К. Зависимость силы линий электрических дипольных f-f переходов от энергии мультиплетов иона  $Pr^{3+}$  в  $YAlO_3$  // ФТТ 1990 Т.32, С. 1568
- 12.Kaminski A.A., Kornienko A.A., Chertanov M.I. Parameterization of Electric-Dipole Intensities in  $f^N$  Systems Due to Electron-Correlation Effects //Phys. Stat. Sol. (b). 1986. V.134, №2, P 717
- 13 Tröster Th., Gregorian T., Holzapfel W.B Energy levels of  $Nd^{3+}$  and  $Pr^{3+}$  in  $RCl_3$  under pressure // Phys. Rev B. 1993 V.48, №5, P 2960
- 14.Химическая энциклопедия· В 5 т. Сов. энцикл., М., 1990 Т.2, 671 С.
- 15.Gregorian T., d'Amour-Sturm H., Holzapfel W.B Effect of pressure and crystal

- structure on energy levels of  $\text{Pr}^{3+}$  in  $\text{LaCl}_3$  // *Phys.Rev* 1989 V.39, №17, P 12497 - 12519
16. Carnall W T Crystal field analysis of  $\text{LaCl}_3$ ,  $\text{Am}^{3+}$  and  $\text{AmCl}_3$  and its relationship to the spectra of frozen solutions of  $\text{Am}^{3+}$  (aquo) // *J Less-Com. Metals*. 1989 V 156, P 221-235
17. Корниенко А.А., Дунина Е.Б., Шадурский А.В. Алгоритм вычисления интегралов перекрытия в системе компьютерной алгебры «MAPLE» // *Вестник УО «Витебский государственный технологический университет»* 2005 Вып.7, С. 137-140
18. Фомичева Л.А., Корниенко А.А., Дунина Е.Б. Влияние межконфигурационного взаимодействия на расщепление мультиплетов иона  $\text{U}^{4+}$  в кристалле  $\text{UF}_4$  // *Вестник УО «Витебский государственный технологический университет»* 2005 Вып.7, С.141-145
19. Dunina E.B., Fomicheva L.A, Kornienko A.A. Correlation between the Stark multiplet structure and absorption line intensities of  $\text{Tm}^{3+}$  in  $\text{LiYF}_4$  // *Physics of electronic materials. 2<sup>nd</sup> International Conference Proceedings. Kaluga, Russia, May 24-27, 2005* P 301-304
20. Дунина Е.Б., Корниенко А.А., Фомичева Л.А. Описание сил осцилляторов межмультиплетных электрических дипольных переходов урана // *Вестник УО «Витебский государственный технологический университет»* 2005 Вып.9, С.119-123
21. Орехова А., Дунина Е.Б. Применение метода наименьших квадратов для определения параметров интенсивности // *Тезисы докладов XXXVIII научно-технической конференции преподавателей и студентов университета / УО «ВГТУ»* Витебск: УО «ВГТУ», 2005 С. 101
22. Фомичева Л.А., Корниенко А.А. Расчет шарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Am}^{3+}$  в эльпасолитах // *Тезисы докладов XXXVIII научно-технической конференции преподавателей и студентов университета / УО «ВГТУ»* Витебск: УО «ВГТУ», 2005 С. 109 - 110
23. Корниенко А.А., Фомичева Л.А., Дунина Е.Б. Описание шарковской структуры иона  $\text{Tm}^{3+}$  в  $\text{LiYF}_4$  с учетом межконфигурационного взаимодействия // *Актуальные проблемы физики твердого тела. сб. докл. Междунар. науч. конф., 26–28 окт. 2005г., Минск. В 2 т Т 2 / редкол. Н.М. Олехнович и др. Мн. Изд. центр БГУ, 2005 С. 163 - 165*
24. Фомичева Л.А., Корниенко А.А., Дунина Е.Б. Определение параметров ковалентности на основе анализа шарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Tm}^{3+}$  в  $\text{LiYF}_4$  // *Оптика 2005 Труды четвертой международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика-2005» Санкт–Петербург, 17-21*

октября 2005 Под. ред. проф. В.Г.Беспалова, проф. С.А.Козлова. СПб  
СПбГУ ИТМО, 2005 С. 291 - 292.

25 Фомичева Л.А., (науч. рук. А.А.Корниенко) Влияние конфигурационного взаимодействия на штарковскую структуру мультиплетов иона  $\text{Am}^{3+}$  в эльпасолитах // Одиннадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных. Сб. тезисов. 24-31 марта 2005 года. Екатеринбург, 2005 С. 332 - 333

26.Г.Е.Малашкевич, Г.П.Шевченко, Ю.В.Бокшиц, А.А.Корниенко, П.П.Першукевич Оптические центры  $\text{Eu}^{3+}$  с высокой эффективностью перехода  $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_4$  в алюминатных гель-пленках. // Оптика и спектр. 2005 Т.98, С. 224.

