

ОПИСАНИЕ ШТАРКОВСКОЙ СТРУКТУРЫ МУЛЬТИПЛЕТОВ ИОНА Pr^{3+} В КРИСТАЛЛЕ $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)$

Фомичева Л.А., Корниенко А.А.*, Дунина Е.Б.*

Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, Минск, Беларусь

* Витебский государственный технологический университет,
Витебск, Беларусь

В приближении слабого и аномально сильного конфигурационного взаимодействия выполнено описание штарковской структуры мультиплетов иона Pr^{3+} в кристалле $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)$. На основе выполненных расчетов определены параметры кристаллического поля и параметры ковалентности.

Известно, что описание экспериментальных результатов по интенсивностям абсорбционных полос и по штарковскому расщеплению мультиплетов иона Pr^{3+} представляет серьезную проблему. В связи с этим в данной работе выполнено описание экспериментальных данных для кристаллической системы $\text{YAl}_3(\text{BO}_3): \text{Pr}^{3+}$ [1] сначала с помощью классической теории кристаллического поля:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} B_q^k C_q^k. \quad (1)$$

В этом приближении среднеквадратичное отклонение значений теоретических уровней от экспериментальных составило $33,7 \text{ см}^{-1}$. Для улучшения согласия теоретических расчетов с экспериментальными данными дополнительно были выполнены вычисления с помощью модифицированной теории, полученной в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [2, 3]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left\{ B_q^k + \left(\frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \right. \\ \left. + \sum_i \left(\frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k. \quad (2)$$

Среднеквадратичное отклонение в этом случае составило $16,9 \text{ см}^{-1}$. Таким образом, описание экспериментальных данных в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия улучшилось почти на 50% по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия.

Кроме того, на основе экспериментальных данных по штарковской структуре были получены параметры кристаллического поля нечетной симметрии и параметры ковалентности: $S_3^3 = -1657 \cdot 10^{-4}$, $S_3^5 = 762 \cdot 10^{-4}$, $\gamma_{\sigma f} = -0,028$, $\gamma_{\pi f} = 0,024$.

Расчеты показали, что модифицированная теория кристаллического поля (2) более точно описывает штарковскую структуру по сравнению со стандартной теорией и при этом позволяет получить параметры ковалентности и параметры кристаллического поля нечетной симметрии.

1. M.H. Bartl, K. Gatterer, E. Cavalli, A. Speghini, M. Bettinelli, *Spectrochimica Acta Part A*, **57**, 1981-1990, (2001).

2. E.B. Dunina, A.A. Kornienko, L.A. Fomicheva, *Central European Journal of Physics*, **6**, 407-414, (2008).

3. A.A. Kornienko, E.B. Dunina, L.A. Fomicheva, *Optics and Spectroscopy*, **116**, 683-690, (2014).