

Влияние конфигурационного взаимодействия на интенсивности полос поглощения гольмия в смешанных литий-фосфатных стеклах

Е.Б. Дунина¹, А.А. Корниенко¹, Л.А. Фомичева²

¹ Витебский государственный технологический университет, Витебск,

² Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники, Минск

E-mail: A_A_Kornienko@mail.ru, Famichova@mail.ru

Известно, что смешанные литий-фосфатные стекла имеют нелинейные характеристики электрической проводимости и тепло-проводности. В связи с этим в работе [1] были детально исследованы оптические свойства поглощения и излучения стекол такого состава на предмет нелинейности оптических свойств. При этом было установлено, что описание экспериментальных результатов по теории Джадда-Офельта [2, 3] получается с низкой точностью. Возможно, это обусловлено сильным влиянием возбужденных конфигураций. Поэтому в данной работе выполнен сравнительный анализ интенсивностей полос поглощения в разных приближениях теории интенсивностей, чтобы установить степень влияния возбужденных конфигураций.

Результаты описания экспериментальных сил осцилляторов по теории Джадда-Офельта [2, 3] (J–O), по модифицированной теории Джадда-Офельта [4] (M–J–O) и в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия [5] (ICI) представлены в таблице.

В таблице использованы следующие обозначения: $\Omega_{2,4,6}$ – параметры интенсивности, α , $R_{2,4,6}$ – параметры, обусловленные конфигурационным взаимодействием, σ – среднеквадратичное отклонение.

Уже по величине среднеквадратичного отклонения можно судить об эффективности влияния конфигурационного взаимодействия. Среднеквадратичное отклонение уменьшается от 0.959 в J–O до 0.176 в ICI или на 82 % (в 5.4 раза). Как и следовало ожидать, в теории Джадда-Офельта наибольшее разногласие наблюдается для перехода на группу высоколежащих мультиплетов $^3H_5 + ^3H_6$. Потому что у этих мультиплетов наименьший энергетический зазор с возбужденными конфигурациями и, следовательно, наибольшее влияние этих конфигураций.

Обычно при расчетах интенсивностей f - f переходов учитывают возбужденные конфигурации противоположной четности. Большое различие между параметрами R_2 , R_4 , R_6 как по величине, так и по знаку свидетельствует, что, наряду с возбужденными конфигурациями противоположной четности, существенный вклад в интенсивности переходов дают возбужденные конфигурации с переносом заряда.

Таблица.

Переход ${}^5I_8 \rightarrow {}^{2S+1}L_J$	$E_J, \text{ см}^{-1}$	$f_{\text{expt}} \times 10^6$ [1]	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ J–O	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ M–J–O	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ (ICI)
5F_5	15440	1.977	2.144	2.938	2.104
${}^5S_2 + {}^5F_4$	18270	3.034	2.428	2.509	2.880
5F_3	20590	0.717	0.615	0.457	0.710
${}^5F_2 + {}^3K_8$	21050	0.691	0.786	0.617	0.861
${}^5G_6 + {}^5F_1$	22010	15.442	15.054	15.383	15.423
5G_5	23810	3.131	2.712	2.439	3.143
${}^5G_4 + {}^3K_7$	25750	0.131	0.379	0.237	0.285
${}^3H_5 + {}^3H_6$	27570	1.509	3.680	2.092	1.503
Параметры					
$\Omega_2 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			2.401	3.213	4.666
$\Omega_4 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			1.527	2.083	1.015
$\Omega_6 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			0.622	0.545	0.971
$\alpha \times 10^4, \text{ см}$				-0.293	
$R_2 \times 10^4, \text{ см}$					-0.584
$R_4 \times 10^4, \text{ см}$					0.641
$R_6 \times 10^4, \text{ см}$					-0.501
σ			0.959	0.649	0.176

В приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия заметное улучшение в описании достигнуто для перехода на мультиплеты ${}^5S_2 + {}^5F_4$, что свидетельствует о сильном влиянии конфигурационного взаимодействия на них, несмотря на большой энергетический зазор до возбужденных конфигураций. Возможное объяснение этому эффекту было дано в работе [6], где выдвинута гипотеза о сильной взаимосвязи между мультиплетом 5F_4 и высоколежащим мультиплетом 5G_4 .

1. Ratnakaram Y.C., Srihari N.V., Thirupathi Naidu D. et al. // Optical Materials. 2008. Vol. 30. P. 1635–1643.
2. Judd B.R. // Phys. Rev. 1962. Vol. 127, No. 3. P. 750–761.
3. Ofelt G.S. // J. Chem. Phys. 1962. Vol. 37, № 3. P. 511–520.
4. Dunina E.B., Kornienko A.A., Fomicheva L.A. // Cent. Eur. J. Phys. 2008. Vol. 6, No. 3. P. 407–414.
5. Kornienko A.A., Dunina E.B., Fomicheva L.A. // Optics and Spectroscopy. 2014. Vol. 116. P. 683–690.
6. Dunina E.B., Kornienko A.A., Fomicheva L.A., Григорьева М.В. // ЖПС. 2018. Т. 85 № 3. С. 399–407.