

Анализ эффективности применения теории кристаллического поля в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия для описания штарковской структуры мультиплетов ионов Pr^{3+}

Л.А. Фомичева^{1*}, А.А. Корниенко², Е.Б. Дунина²

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 РБ, Минск, ул. П.Бровки, 6, Беларусь, fatichova@mail.ru

²Витебский государственный технологический университет, 210035 РБ, Витебск, Московский пр., 72, Беларусь

В работе анализируются результаты расчетов, выполненных в приближении слабого и аномально сильного конфигурационного взаимодействия для различных кристаллических систем: $\text{La}_2\text{O}_3:\text{Pr}^{3+}$, Pr_2O_3 , $\text{GaN}:\text{Pr}^{3+}$, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Pr}^{3+}$, $\text{YPO}_4:\text{Pr}^{3+}$, $\text{Cs}_2\text{NaPrCl}_6:\text{Pr}^{3+}$, $\text{Cs}_2\text{NaYCl}_6:\text{Pr}^{3+}$, $\text{Cs}_2\text{NaYBr}_6:\text{Pr}^{3+}$. Показано, что предложенная теория кристаллического поля может быть успешно применена для описания штарковской структуры кристаллических систем, активированных ионом Pr^{3+} .

Расчеты в приближении слабого конфигурационного взаимодействия выполняются с помощью гамильтониана:

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

Были выполнены расчеты в приближении промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия. Оказалось, что во многих случаях результаты, полученные в приближении промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия, несущественно отличались от расчетов, полученных в приближении слабого конфигурационного взаимодействия. Для улучшения согласия теоретических расчетов с экспериментальными данными был использован модифицированный гамильтониан, полученный в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [1,2]:

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

Согласие экспериментальных и теоретических данных при выполнении расчетов в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия для всех рассматриваемых систем улучшилось по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия.

Выполненные расчеты позволяют утверждать, что предложенная теория кристаллического поля может быть успешно применена для описания штарковской структуры кристаллических систем, активированных ионом Pr^{3+} , поскольку наблюдается заметное уменьшение среднеквадратичного отклонения теоретических данных от экспериментальных. Кроме того, хорошее согласие определенных при таком описании параметров ковалентности с параметрами ковалентности, полученными с помощью микроскопических моделей, также свидетельствует в пользу применяемой теории.

Список использованных источников

- [1] Л.А. Фомичева [и др.] ЖТФ 77(10) (2007) 6-10.
- [2] Е.В. Dunina [et al.] Cent. Eur. J. Phys. 6(3) (2008) 407-414.