

Анализ штарковского расщепления мультиплетов иона Am^{3+} в эльпасолите $\text{Cs}_2\text{NaLuCl}_6$ в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия

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

Выполнен анализ штарковского расщепления мультиплетов иона Am^{3+} в эльпасолите $\text{Cs}_2\text{NaLuCl}_6$ с учетом межконфигурационного взаимодействия. Показано, что влияние возбужденных конфигураций существенно. По результатам анализа штарковского расщепления впервые определены параметры ковалентности.

Влияние возбужденных конфигураций на штарковское расщепление учитывалось с помощью гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [1]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left\{ B_q^k + \left(\frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \right. \\ \left. + \sum_i \left(\frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k(c). \quad (1)$$

Здесь Δ_d – энергия конфигурации противоположной четности $4f^{N-1}5d$; Δ_{ci} – энергия конфигурации с переносом заряда.

Обычно определяющий вклад в параметры $\tilde{G}_q^k(d)$ дают конфигурации противоположной четности $4f^{N-1}5d$ и конфигурации с переносом заряда. Но поскольку ион Am^{3+} в кристалле $\text{Cs}_2\text{NaLuCl}_6$ занимает центрально-симметричные позиции, то и в этом случае гамильтониан (1) можно записать в следующем виде:

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

Таким образом, в гамильтониане (2) в расчет принимается только вклад от процессов с переносом заряда.

Величина наиболее существенных вкладов в $\tilde{G}_q^k(c)$ от процессов с переносом заряда задается выражением [2]:

$$\tilde{G}_q^k(c) = \sum_b \tilde{J}^k(b) C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b). \quad (3)$$

Для параметров $\tilde{J}^k(b)$ удобно использовать приближенные выражения [2]:

$$\tilde{J}^2(b) \approx \frac{5}{28} [2\gamma_{\sigma f}^2 + 3\gamma_{\pi f}^2]; \quad \tilde{J}^4(b) \approx \frac{3}{14} [3\gamma_{\sigma f}^2 + \gamma_{\pi f}^2]; \quad \tilde{J}^6(b) \approx \frac{13}{28} [2\gamma_{\sigma f}^2 - 3\gamma_{\pi f}^2]. \quad (4)$$

Здесь $\gamma_{if}(i=\sigma, \pi)$ – параметры ковалентности.

В приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия удалось значительно улучшить согласие теоретических расчетов и экспериментальных данных.

[1] Е.В. Dunina [et al.] Cent. Eur. J. Phys. 6(3) (2008) 407-414.

[2] А.А. Корниенко. Теория спектров редкоземельных ионов в кристаллах. ВГУ, Витебск. (2003). 128.