

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Функциональные и машиностроительные материалы и технологии, наноматериалы» под общим руководством проф. Рубаника В.В.

УДК 539.194

СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ АБСОРБЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ЕВРОПИЯ В ОКСИДНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Студ. Павлова Е.В., проф. Корниенко А.А., доц. Дунина Е.Б.

Витебский государственный технологический университет

Стекла, активированные ионами Eu^{3+} , являются перспективными материалами для создания таких оптических устройств, как лазеры, оптоволоконные усилители, ультрафиолетовые детекторы и запоминающие устройства с высокой плотностью записи информации. По этой причине спектроскопические свойства стекол с примесью трехвалентного европия детально исследуются экспериментально. При этом большую трудность представляет идентификация полос поглощения, соответствующих переходам на высоко лежащие уровни. Для корректного соотнесения полос поглощения необходим теоретический расчет интенсивностей абсорбционных переходов. Часто такой расчет выполняют в приближении Джадда-Офельта [1, 2]. Однако в этом приближении влияние возбужденных конфигураций учитывается не в полной мере, тогда как для иона Eu^{3+} их влияние очень существенно. В связи с этим в данной работе выполнен сравнительный анализ описания абсорбционных переходов иона европия в различных приближениях теории интенсивностей и сделан вывод о наиболее адекватном приближении.

Силы осцилляторов электрических дипольных переходов наиболее просто вычисляются в приближении Джадда-Офельта (D-O) [1, 2]:

$$S_{JJ'}^{ed} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \langle J | U^k | J' \rangle^2, \quad (1)$$

где Ω_k – параметры интенсивности, $\langle J | U^k | J' \rangle$ – приведенные матричные элементы единичных тензорных операторов U^k .

Иногда описание абсорбционных переходов $5f^6$ ионов получается достаточно успешным в приближении сильного конфигурационного взаимодействия (SCI) [3]:

$$S_{JJ'}^{ed} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \left(\frac{\Delta}{\Delta - E_{J'}} + \frac{\Delta}{\Delta - E_{J''}} \right)^2 \langle J | U^k | J' \rangle^2, \quad (2)$$

где Δ – средняя энергия возбужденных конфигураций с переносом заряда и конфигурации противоположной четности, $E_{J'}$, $E_{J''}$ – энергии мультиплетов, включенных в переход.

Вместе с тем, что касается иона Eu^{3+} , имеющего электронную конфигурацию $4f^7$, применение формулы (2) может осложниться тем, что энергия возбужденной конфигурации $4f^65d$ и, следовательно, параметр Δ имеют значение порядка 50000–80000 cm^{-1} . При таких значениях Δ зависимость от энергии мультиплетов в формуле (2) будет незначительной. По этой причине описание было выполнено еще и в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия (ASCI) [4]:

$$S_{J,J'}^{el} = \frac{e^2}{4} \sum_{k=2,4,6} \left\langle J \left| U^k \right| J' \right\rangle^2 \times O_{dk} \left(\frac{\Delta_d}{\Delta_d - E_{J'}} + \frac{\Delta_d}{\Delta_d - E_{J''}} \right) + \\ \times O_{ck} \left[\left(\frac{\Delta_{c1}}{\Delta_{c1} - E_{J'}} + \frac{\Delta_{c1}}{\Delta_{c1} - E_{J''}} \right) + \left(\frac{\Delta_{c2}}{\Delta_{c2} - E_{J'}} + \frac{\Delta_{c2}}{\Delta_{c2} - E_{J''}} \right) + \dots \right]^2 \quad (3)$$

Здесь Δ_d – энергия возбужденной конфигурации противоположной четности $4f^{N-1}5d$, Δ_{c1}, Δ_{c2} – энергии возбужденных конфигураций, соответствующих переносу заряда.

Энергии возбужденных конфигураций и параметры O_{dk}, O_{ck} мы будем рассматривать как варьируемые параметры при описании экспериментальных значений сил линий абсорбционных переходов. Формула (3) при определенных условиях переходит в формулы (1) и (2). В приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия можно успешно описывать интенсивности спектров поглощения даже в случаях, когда одна или несколько абсорбционных полос имеют аномально большую интенсивность. Результаты расчета по формулам (1 – 3) представлены в таблице.

Таблица – Экспериментальные [5] и вычисленные силы линий межмультиплетных переходов (в 10^{-20} см^2) иона Eu^{3+} в цинк боратных стеклах

Переход	λ , нм	Эксперимент [5]	Силы линий, 10^{-20} см^2		
			D-O (1)	ASCI (3)	SCI (2)
$F_1 \rightarrow F_6$	2201.3	0.680	0.745	0.680	0.744
$F_0 \rightarrow F_6$	2100.0	0.450	0.286	0.436	0.285
$F_1 \rightarrow D_0$	587.6	0.004	0.004	0.004	0.004
$F_0 \rightarrow D_0$	577.6	0.000	0.000	0.000	0.000
$F_1 \rightarrow ^3D_1$	5352.5	0.025	0.024	0.015	0.021
$F_0 \rightarrow ^5D_1$	525.7	0.001	0.001	0.001	0.001
$F_0 \rightarrow ^5D_2$	464.4	0.009	0.008	0.009	0.007
$F_1 \rightarrow ^5D_3$	415.8	0.012	0.013	0.010	0.007
$F_0 \rightarrow ^5D_3$	414.3	0.002	0.000	0.000	0.000
$F_1 \rightarrow ^3L_6$	399.7	0.066	0.018	0.035	0.024
$F_0 \rightarrow ^3L_6$	393.7	0.042	0.031	0.086	0.041
$F_1 \rightarrow ^3L_1 \dots ^5G_3$	384.9	0.059	0.060	0.097	0.068
$F_0 \rightarrow ^5G_3$	382.5	0.006	0.008	0.011	0.008
$F_1 \rightarrow ^5G_5 \dots ^5G_4$	379.2	0.042	0.035	0.066	0.044
$F_0 \rightarrow ^5G_6 \dots ^5G_3$	373.3	0.011	0.013	0.025	0.012
$F_1 \rightarrow ^3D_4$	366.1	0.005	0.005	0.004	0.002
$F_0 \rightarrow ^5D_4$	361.8	0.009	0.008	0.003	0.0004
Среднеквадратичное отклонение			0.053	0.030	0.055

Из таблицы видно, что самыми интенсивными являются переходы $^7F_1 \rightarrow ^7F_6$ и $^7F_0 \rightarrow ^7F_6$. Дать удовлетворительное описание силы линии этих переходов не в состоянии ни приближение D-O (1), ни приближение SCI (2). Объясняется это тем, что мультиплет 7F_6 иона европия в цинк боратных стеклах взаимодействует с окружающими ионами существенно сильнее (аномально сильно), чем другие мультиплеты. Это аномально сильное взаимодействие достаточно успешно учитывается в приближении ASCI (3). Среднеквадратичное отклонение вычисленных сил линий переходов от соответствующих экспериментальных при этом уменьшается на 43 % по сравнению с приближением D-O и SCI. Таким образом, наиболее адекватным является приближение аномально сильного конфигурационного взаимодействия (ASCI).

Список использованных источников

1. Judd, B. R. Optical Absorption Intensities of Rare-Earth Ions / B. R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750-761.
2. Ofelt, G. S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G. S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol. 37, №3. – P. 511-520.
3. Корниенко, А. А. Теория интенсивностей электрических дипольных переходов в приближении сильного конфигурационного взаимодействия / А. А. Корниенко, Е. Б. Дунина, В. Л. Янкевич // Опт. и спектр. – 1996. – Т. 80. – С. 871-874.
4. Dunina, E. B. Modified theory of f-f transition intensities and crystal field for systems with anomalously strong configuration interaction / E. B. Dunina, A. A. Kornienko, L. A. Fomicheva // Cent. Eur. J. Phys.–2008. – Vol. 6, №3.–P. 407-414.
5. Ivankov, A. Optical properties of Eu³⁺-doped zinc borate glasses / A. Ivankov, J. Seekamp, W. Bauhofer // J. Lumin. – 2006. – Vol. 121. – P. 123 – 131.

УДК 621.791.1

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНОГО ШВА ПОСЛЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВАРКИ

Д.т.н. Рубаник В.В., к.с. Луцко В.Ф., асп. Шрубиков С.Н.

УО «Витебский государственный технологический университет»;

ГНУ «Институт технической акустики НАН Беларуси

При заготовке и переработке донорской крови применяют полимерную тару, которая обычно состоит из двух пластиковых контейнеров (гемоконтейнеры), соединенных между собой магистралями из трубок поливинилхлоридного пластика. Для обеспечения длительного хранения и стерильности находящейся в гемоконтейнерах крови требуется герметичная запайка полимерных трубок. Особенно актуальным является сохранение надежной герметизации гемоконтейнеров в условиях низких температур при так называемой "шоковой заморозке" до -73 ± 5 °C и длительном хранении в течение 140 дней при температуре -30 °C+-40 °C [1].

Запайку полимерных трубок систем переливания крови чаще всего производят сваркой токами высокой частоты. Для этих целей используется также ультразвуковая сварка, обеспечивающая формирование герметизирующего шва за счет введения в зону сварки ультразвуковых колебаний высокой интенсивности. Ультразвуковая сварка пластмасс позволяет выполнять соединения по поверхностям, загрязненным различными продуктами крови.

В настоящей работе приводятся результаты исследования влияния температуры окружающей среды на прочность соединения после ультразвуковой сварки ПВХ пластика. Для испытаний на растяжение сварных швов было выбрано Т-образное соединение, соответствующее по ГОСТ 16971-71.