

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ ИОНА Pr^{3+} В YPO_4

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

Витебский государственный технологический университет, Витебск

В ходе работы было выполнено исследование влияния возбужденных конфигураций на расщепление мультиплетов иона Pr^{3+} в кристалле YPO_4 , были определены параметры межконфигурационного взаимодействия.

Расчеты в приближении слабого конфигурационного взаимодействия

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

не позволили получить удовлетворительное описание штарковской структуры мультиплетов иона Pr^{3+} в YPO_4 . Наилучшего описания штарковской структуры удастся достичь с помощью гамильтониана (2), полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [1]:

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

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

Стандартное среднеквадратичное отклонение в этом случае составляет $\sigma = 12.9 \text{ см}^{-1}$, т.е. на 38% меньше среднеквадратичного отклонения, полученного при описании штарковских уровней в приближении слабого конфигурационного взаимодействия.

При описании штарковской структуры были определены параметры кристаллического поля четной и нечетной симметрии, а также параметры ковалентности (см. табл.), на основе которых можно вычислить параметры интенсивности.

$B_0^2, \text{ см}^{-1}$	$B_0^4, \text{ см}^{-1}$	$B_4^4, \text{ см}^{-1}$	$B_0^6, \text{ см}^{-1}$	$B_4^6, \text{ см}^{-1}$
136	299	1058	-1335	-13
C_2^3	C_2^5	γ_σ	γ_π	
0,0226	0,0216	-0,0138	0,0116	

1. *Dunina E. B., Kornienko A. A., Fomicheva L. A.* // Cent. Eur. J. Phys. 2008. Vol. 6, N 3. P. 407–414.