

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ АБСОРБЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ НАНОКОМПЛЕКСОВ KY(MoO4)2:Pr3+

Экспериментальными методами подробно исследованы спектральные свойства KY(MoO4)2:Pr3+ и установлено, что для корректного описания интенсивностей абсорбционных переходов необходимо учитывать конфигурационное взаимодействие. Поэтому в данной работе выполнено компьютерное моделирование абсорбционных переходов с учетом влияния возбужденных конфигураций.

Таблица

Поглощение с уровня ${}^3H_4 \rightarrow$	Энергии переходов в $\text{см}^{-1}$	Экспериментальные значения	Без учета конфигурационного взаимодействия	с учетом конфигурационного взаимодействия
		$S_{\text{экс}} \times 10^{20}$	$S_{\text{выч}} \times 10^{20}$	$S_{\text{выч}} \times 10^{20}$
${}^3H_5 + {}^3F_2$	4600	16,453	15,681	16,243
${}^3F_3 + {}^3F_4$	6510	12,953	13,560	13,286
${}^1G_4$	9920	0,273	0,156	0,230
${}^1D_2$	16840	1,560	0,540	1,208
${}^3P_0$	20620	1,717	2,928	1,888
${}^1I_6 + {}^3P_1$	21350	3,653	3,912	3,771
${}^3P_2$	22350	4,580	1,262	4,079
$\epsilon$			1,908	0,437

Результаты расчетов, приведенные в таблице, показывают, что при учете конфигурационного взаимодействия среднее квадратичное отклонение  $\epsilon$  вычисленных сил линий  $S$  от экспериментальных уменьшается в четыре раза. Таким образом, конфигурационное взаимодействие оказывает существенное влияние на свойства высоколежащих мультиплетов.

### Список использованных источников

1. Weijie Guo, Yanfu Lin, Xinghong Gong et al. Spectroscopic properties of  $\text{Pr}^{3+} : \text{KY}(\text{MoO}_4)_2$  crystal as a visible laser gain medium, J. of Physics and Chemistry of Solids 69 (2008) 8-15