

Учет контраста скоростей различных процессов и использование квазистационарного приближения при решении системы уравнений материального баланса позволили получить аналитическое выражение для определения убыли концентрации исходной формы красителя  $K$  от времени  $t$ .

$$K = \exp \left( - \frac{(k_{ch}^S \cdot k_{isc}^* + k_{ch}^T \cdot k_{ic}^S) I \varepsilon_1 \varepsilon_2}{k_{ic}^S \left[ (k_{ic}^T + k_{isc}^*) \varepsilon_1 + k_f \frac{k_{isc}^*}{k_{isc}} \varepsilon_2 \right]} t \right). \quad (1)$$

Полученная формула удобна для интерпретации экспериментальных результатов по исследованию кинетики обесцвечивания твердых растворов красителей в поле непрерывного резонансного лазерного излучения. Такое исследование не требует сложных экспериментальных установок и позволяет изучать эффективность процессов с участием ВЭС по кинетике населенности основного состояния красителя.

Список публикаций:

[1] Gratz H., Penzkofer A., *J. Photochemistry and Photobiology*, A127, 21-30 (1999).

[2] Сизых А. Г., Тараканова Е. А., Татарнинова Л. Л., *Квантовая электроника*, 30, 1, 40-44 (2000).

[3] Слюсарева Е. А., Тарбецкая К. С., *Тезисы докладов научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых НКФС – XXXV(2006) / Краснояр. гос. ун-т; под ред. доц. П. П. Турчина. – Красноярск: РИО КрасГУ, 2006, 22.*

## Влияние межконфигурационного взаимодействия на расщепление мультиплетов иона $\text{Pr}^{3+}$ в кристалле $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$

Фомичева Людмила Александровна

Институт технической акустики НАН Беларуси

Корниенко Алексей Александрович, д.ф.-м.н.

[famichova@mail.ru](mailto:famichova@mail.ru)

В работе исследована адекватность различных моделей кристаллического поля для описания спектроскопических свойств празеодима. Предложены эффективные гамильтонианы для наиболее адекватного моделирования. В результате описания энергетического спектра празеодима получены параметры четного и нечетного кристаллического поля и параметры ковалентности. На основе параметров ковалентности и параметров нечетного кристаллического поля вычислены параметры интенсивностей иона  $\text{Pr}^{3+}$  в  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ .

Применение стандартной теории кристаллического поля не позволяет получить адекватное описание штарковских уровней иона  $\text{Pr}^{3+}$  в гранате [1]. Это обусловлено тем, что у 4f-элементов возбужденные конфигурации расположены достаточно низко и условие слабого конфигурационного взаимодействия не выполняется. Более детально влияние возбужденных конфигураций можно учесть в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия. В этом приближении гамильтониан кристаллического поля имеет вид [2]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{\left[ B_q^k + (E_J + E_{J'} - 2E_f^0) G_q^k \right]}_{\tilde{B}_q^k} C_q^k, \quad (1)$$

где  $E_J$ ,  $E_{J'}$  – энергия мультиплетов;  $E_f^0$  – центр тяжести энергии  $5f^N$  конфигурации;  $G_q^k$  – параметры, обусловленные межконфигурационным взаимодействием.

Применение гамильтониана (1) также не позволяет значительно улучшить описание штарковской структуры  $\text{Pr}^{3+}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ . Иногда влияние возбужденных конфигураций настолько сильное, что для адекватного описания штарковской структуры необходимо использовать гамильтониан кристаллического поля в приближении сильного конфигурационного взаимодействия [3]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{\left[ B_q^k + \left( \frac{\Delta^2}{\Delta - E_J} + \frac{\Delta^2}{\Delta - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k \right]}_{\bar{B}_q^k} C_q^k, \quad (2)$$

где  $\Delta$  – энергия возбужденной конфигурации.

Применение гамильтониана кристаллического поля в приближении сильного конфигурационного взаимодействия (2) заметно улучшило согласие теории с экспериментом, но для некоторых мультиплетов

наблюдалось значительное отклонение рассчитанных значений энергии от экспериментальных. Возможной причиной этого является предположение о близком значении энергий возбужденной конфигурации противоположной четности и конфигурации с переносом заряда. Если эти конфигурации имеют существенно разные энергии, то вместо гамильтониана кристаллического поля (2) следует использовать следующий модифицированный гамильтониан:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{\left[ B_q^k + \left( \frac{\Delta_{df}^2}{\Delta_{df} - E_J} + \frac{\Delta_{df}^2}{\Delta_{df} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \left( \frac{\Delta_{cv}^2}{\Delta_{cv} - E_J} + \frac{\Delta_{cv}^2}{\Delta_{cv} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(\text{cov}) \right]}_{\bar{B}_q^k} C_q^k, \quad (3)$$

где  $\Delta_{df}$  – энергия возбужденной конфигурации  $5f^{N-1}6d$ ;  $\Delta_{cv}$  – энергия конфигурации с переносом заряда.

Применение гамильтониана (3) позволило значительно улучшить описание штарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ .

Т.о., установлено, что наилучшее описание штарковского расщепления мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$ :  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  достигается с помощью модифицированного гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении сильного конфигурационного взаимодействия. В этом гамильтониане учитывается, что возбужденные конфигурации и конфигурации с переносом заряда имеют существенно разные энергии.

В результате описания штарковской структуры получены параметры нечетного кристаллического поля и параметры ковалентности. На основе параметров ковалентности и параметров нечетного кристаллического поля, полученных из описания штарковской структуры, предсказаны параметры интенсивностей.

Список публикаций:

- [1] Moune O. K., Rabinovitch Y., Tretard D., Pham-Thi M., Lallier E., Faucher M. D. *Eur. Phys. J. D* 19, 275–291 (2002).  
 [2] Корниенко А. А., Дунина Е. Б. *Письма в ЖЭТФ*, Т. 59, № 6, С. 385–388 (1994).  
 [3] Корниенко А. А., Каминский А. А., Дунина Е. Б. *ЖЭТФ*, Т. 116, Вып. 6, С. 2087–2102 (1999).

## Влияние температуры на миграционно-ускоренное тушение фосфоресценции нафталина в стеклообразном толуоле

Шаповалова Анна Михайловна

Ставропольский государственный университет

Куликова Ольга Игоревна, к.ф.-м.н.

[o\\_kulikova@rambler.ru](mailto:okulikova@rambler.ru)

Исследована температурная зависимость эффективности миграционно-ускоренного тушения триплетных возбуждений нафталина молекулами кислорода в необезгаженном стеклообразном растворе толуола. Экспериментально установлена зависимость константы скорости миграционно-ускоренного тушения от температуры и определена энергия активации данного процесса. Показано, что причиной роста этого вида тушения с увеличением температуры является обратная миграция, т.е. увеличение вероятности передачи возбуждений в процессе их миграции на более высокорасположенные энергетические уровни нафталина в пределах их статистического разброса.

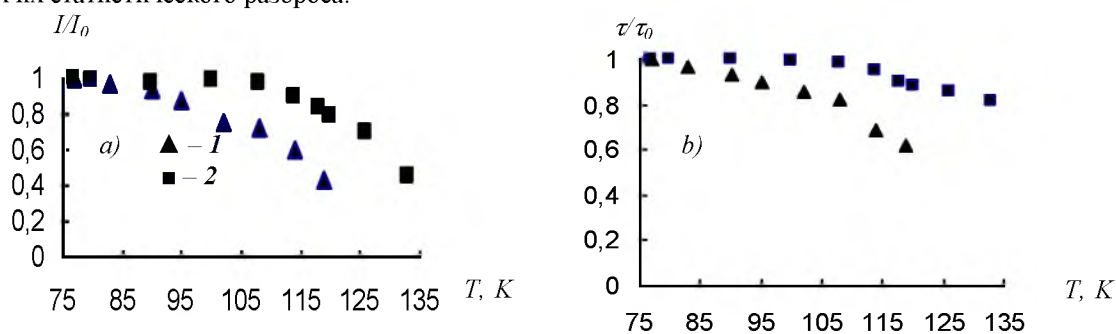


рис.1. Температурная зависимость относительной интенсивности – а), и относительной длительности – б) фосфоресценции нафталина в толуоле при концентрации  $C_H = 0,3 \text{ M}$  – 1) – необезгаженный, 2) – обезгаженный раствор.