

**СПЕКТРОСКОПИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

УДК 535.33:548.0

**ВЗАИМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ ШТАРКОВСКОЙ  
СТРУКТУРЫ МУЛЬТИПЛЕТОВ И ИНТЕНСИВНОСТЕЙ  
АБСОРБЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ИОНА  $\text{Pr}^{3+}$  В  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$**

© 2008 г. Л. А. Фомичева\*, А. А. Корниенко\*\*, Е. Б. Дунина\*\*

\*Институт технической акустики НАН Белоруссии, 210023 Витебск, Белоруссия

\*\*Витебский государственный технологический университет, 210028 Витебск, Белоруссия

E-mail: a\_a\_kornienko@mail.ru; Fomicheva\_L\_A@mail.ru

Поступила в редакцию 27.12.2007 г.

В окончательной редакции 03.04.2008 г.

Выполнено описание штарковской структуры мультиплетов и силы осцилляторов абсорбционных переходов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в кристалле  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  с учетом влияния возбужденной конфигурации противоположной четности и конфигурации с переносом заряда. Для учета этого влияния предложены модифицированный гамильтониан кристаллического поля и эффективный оператор силы линии межмультиплетных электрических дипольных переходов, применение которых для описания экспериментальных данных позволяет уменьшить среднеквадратичное отклонение на 37 и 20% соответственно по сравнению со стандартными теориями. Из описания штарковских уровней получены параметры кристаллического поля с четными и нечетными рангами, а также параметры ковалентности. Параметры интенсивности, вычисленные на основе параметров ковалентности и параметров нечетного кристаллического поля, удовлетворительно согласуются с параметрами, полученными из описания экспериментальных значений сил осцилляторов.

PACS: 31.15.Bs, 71.70.Ch, 78.20.Bh

### ВВЕДЕНИЕ

Изучению спектральных свойств гранатов, легированных редкоземельными элементами, посвящен ряд экспериментальных и теоретических работ [1–8]. Большое внимание уделяется изучению кристаллической системы  $\text{Pr}^{3+}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  [9–14]. Данная система является наиболее простой с точки зрения расчетов, но однозначного мнения о методах теоретического описания этой структуры не существует [9, 12, 14].

В ряде работ [15–20] показано, что существенное влияние на спектроскопические характеристики лантаноидов оказывают возбужденные конфигурации. В [12] хорошее описание системы  $\text{Pr}^{3+}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  было достигнуто с учетом влияния возбужденной конфигурации  $4f6p$ . Но при этом осталась невыясненной роль конфигураций противоположной четности и эффектов ковалентности. Игнорировать влияние конфигураций противоположной четности на штарковское расщепление нельзя, так как именно эти возбужденные конфигурации обуславливают интенсивности переходов  $f-f$ . Эффекты ковалентности также дают значительный вклад в параметры интенсивности [20, 21]. В связи с этим в данной работе анализируется влияние возбужденной конфигурации  $4f5d$  и конфигураций с переносом заряда на штарков-

скую структуру мультиплетов и интенсивности абсорбционных переходов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ .

Выполнено сравнение параметров интенсивности, вычисленных из штарковской структуры мультиплетов и полученных из описания экспериментальных сил осцилляторов абсорбционных переходов.

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

В приближении слабого конфигурационного взаимодействия описание экспериментальных данных по штарковской структуре выполняют с помощью одноэлектронного гамильтониана кристаллического поля

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

где  $B_q^k$  – параметры кристаллического поля с четными и нечетными рангами  $k$ . В этом приближении предполагается, что энергии возбужденных конфигураций значительно выше энергий мультиплетов.

Условие слабости конфигурационного взаимодействия для элементов с незаполненной  $4f$ -оболочкой не выполняется, так как энергии возбужденных конфигураций порядка энергий высо-

колежащих мультиплетов. Влияние возбужденных конфигураций более детально учитывается в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия [22]

$$H_{cf} = \sum_{k,q} [B_q^k + (E_J + E_{J'} - 2E_f^0)G_q^k]C_q^k, \quad (2)$$

где  $E_J, E_{J'}$  – энергии мультиплетов,  $E_f^0$  – центр тяжести конфигурации  $4f^N$ ,  $G_q^k$  – параметры, обусловленные межконфигурационным взаимодействием.

Иногда влияние возбужденных конфигураций настолько сильно, что для адекватного описания экспериментальных данных расчеты необходимо выполнять в приближении сильного конфигурационного взаимодействия [18]

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left[ B_q^k + \left( \frac{\Delta^2}{\Delta - E_J} + \frac{\Delta^2}{\Delta - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k \right] C_q^k, \quad (3)$$

где  $\Delta$  – средняя энергия возбужденной конфигурации.

Формула (3) справедлива, если определяющий вклад в параметры межконфигурационного взаимодействия  $\tilde{G}_q^k$  дает лишь одна или несколько возбужденных конфигураций с близкими значениями величины  $\Delta$ .

Если возбужденные конфигурации существенно разнесены по энергии, то эффективный гамильтониан имеет более сложный вид [23]

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left\{ B_q^k + \left( \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \sum_i \left( \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k, \quad (4)$$

Здесь  $\Delta_d$  – средняя энергия возбужденной конфигурации  $4f^{N-1}5d$ ,  $\Delta_{ci}$  – энергия конфигурации с переносом заряда.

Вклады возбужденной конфигурации противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  в  $\tilde{G}_q^k$  можно оценить по формуле [22]

$$\tilde{G}_q^k(d) = -\frac{2k+1}{2\langle f \| C^k \| f \rangle} \sum_{p',p'',t',t''} \sum_{t''} (-1)^q \begin{pmatrix} p' & p'' & k \\ t' & t'' & -q \end{pmatrix} \times \left\{ \begin{matrix} p' & p'' & k \\ f & f & d \end{matrix} \right\} \langle f \| C^{p'} \| d \rangle \langle d \| C^{p''} \| f \rangle \frac{B_{r'}^{p'}(d) B_{r''}^{p''}(d)}{\Delta_d \Delta_d}, \quad (5)$$

где  $B_{r'}^{p'}(d), B_{r''}^{p''}(d)$  – параметры кристаллического поля с нечетными рангами.

Вклад в  $\tilde{G}_q^k$  от процессов с переносом заряда задается выражением [18]

$$\tilde{G}_q^k(c) = \sum_b \tilde{J}^k(b) C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b). \quad (6)$$

Здесь суммирование осуществляется по лигандам ближайшего окружения,  $\Theta_b, \Phi_b$  – сферические углы, определяющие направление на лиганд  $b$ .

Для расчета параметров  $\tilde{J}^k(b)$  удобно использовать приближенные выражения [20]

$$\begin{aligned} \tilde{J}^2(b) &\approx (5/28)(2\gamma_{\sigma f}^2 + 3\gamma_{\pi f}^2), \\ \tilde{J}^4(b) &\approx (3/14)(3\gamma_{\sigma f}^2 + \gamma_{\pi f}^2), \\ \tilde{J}^6(b) &\approx (13/28)(2\gamma_{\sigma f}^2 - 3\gamma_{\pi f}^2), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\gamma_{if}$  ( $i = \sigma, \pi$ ) – параметры ковалентности, соответствующие переходу электрона из  $i$ -оболочки лиганда в  $f$ -оболочку лантаноида.

Как отмечалось в [15–20], возбужденные конфигурации  $4f^{N-1}5d$  дают существенный вклад в энергии штарковских уровней. Эти же возбужденные конфигурации снимают запрет на внутриконфигурационные переходы  $f-f$ , поэтому тонкие детали штарковской структуры мультиплетов и интенсивности межмультиплетных электрических дипольных переходов взаимосвязаны. Эту взаимосвязь можно проследить в нижеприведенных формулах.

Основной характеристикой межмультиплетных электрических дипольных переходов является сила линии [24]

$$S_{JJ'}^{\text{ed}} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \langle \gamma[LS]J \| U^k \| \gamma'[L'S']J' \rangle^2, \quad (8)$$

где  $\Omega_k$  – параметры интенсивности.

В приближении сильного конфигурационного взаимодействия в рамках тех же предположений, что и в (4), для силы линии можно записать выражение

$$S_{JJ'}^{\text{ed}} = \frac{1}{4(2k+1)e^2} \times \sum_{p,t} \left| \sum_l S_t^{(1k)p}(l) \left( \frac{\Delta_l}{\Delta_l - E_J} + \frac{\Delta_l}{\Delta_l - E_{J'}} \right) \right|^2 \times \langle \gamma[LS]J \| U^k \| \gamma'[L'S']J' \rangle^2, \quad (9)$$

**Таблица 1.** Параметры гамильтониана кристаллического поля с четными рангами ( $\text{см}^{-1}$ ), определенные в приближении слабого (а) [12] и сильного (б) конфигурационных взаимодействий

Приближение	$B_0^2$	$B_2^2$	$B_0^4$	$B_2^4$	$B_4^4$	$B_0^6$	$B_2^6$	$B_4^6$	$B_6^6$	$\sigma, \text{см}^{-1}$
a	-427	-88	-3171	-322	1359	713	243	1690	195	30.7
b	-437	-90	-3238	-329	1388	728	248	1725	199	19.3

где ведется суммирование по возбужденным конфигурациям  $l$ .

Возбужденная конфигурация противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  дает наибольший вклад в параметры  $S_t^{(1k)p}$  [20]:

$$S_t^{(1k)p}(d) = 2|e| \frac{B_t^{p*}(d)}{\Delta_d} \frac{2k+1}{\sqrt{2p+1}} \times \left\{ \begin{matrix} 1 & k & p \\ f & d & f \end{matrix} \right\} \langle f \| C^p \| d \rangle \langle d \| C^1 \| f \rangle \langle r_{df} \rangle. \quad (10)$$

Влияние процессов с переносом заряда можно оценить по приближенным формулам [20]

$$S_t^{(1k)p}(c) = \sum_b S_t^{(1k)p}(b) C_t^p(\Theta_b, \Phi_b), \quad (11)$$

где

$$S_t^{(1k)p}(b) \approx -\frac{27}{2} |e| \langle r_{df} \rangle (2k+1) \sqrt{2p+1} \times \sum_q (-1)^q \left\{ \begin{matrix} 1 & k & p \\ -q & q & 0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & k & f \\ -q & q & 0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & 1 & d \\ -q & q & 0 \end{matrix} \right\} \gamma_{sf}^2 + \left[ \left\{ \begin{matrix} f & k & f \\ -(q+1) & q & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & 1 & d \\ -(q+1) & q & 1 \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} f & k & f \\ -(q-1) & q & -1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & 1 & d \\ -(q-1) & q & -1 \end{matrix} \right\} \right] \gamma_{pf}^2. \quad (12)$$

Анализ формул (5), (10) и (7), (12) показывает, что параметры кристаллического поля с нечетными рангами и параметры ковалентности задают как поправки к энергии штарковских уровней, так и силу линии межмультиплетных электрических дипольных переходов. Это подтверждает существование корреляции между тонкими деталями штарковской структуры мультиплетов и интенсивностями спектральных линий.

Описание интенсивностей межмультиплетных переходов  $f-f$  с помощью формул (9)–(12) является сложной задачей из-за большого числа варьи-

руемых параметров. Если количество экспериментальных данных небольшое, то рациональнее использовать выражение для силы линии с наименьшим числом варьируемых параметров  $O_{dk}$ ,  $O_{ck}$  ( $k = 2, 4, 6$ ) и  $\Delta_d$ ,  $\Delta_{ci}$ :

$$S_{JJ'}^{\text{ed}} = \frac{e^2}{4} \sum_{k=2,4,6} \langle \gamma[LS]J \| U^k \| \gamma[L'S']J' \rangle^2 \times \left[ O_{dk} \left( \frac{\Delta_d}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d}{\Delta_d - E_{J'}} \right) + O_{ck} \sum_i \left( \frac{\Delta_{ci}}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \right]^2. \quad (13)$$

Параметры  $O_{dk}$  и  $\Delta_d$  относятся к возбужденной конфигурации противоположной четности  $4f^{N-1}5d$ , а  $O_{ck}$  и  $\Delta_{ci}$  обусловлены возбужденными конфигурациями с переносом заряда (эффекты ковалентности).

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Ионы  $\text{Pr}^{3+}$  имеют незаполненную  $4f^2$ -оболочку, состояния которой распределены по тринадцати мультиплетам. Характер расщепления мультиплетов и количество компонент зависит от симметрии поля. В кристалле  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  ионы  $\text{Pr}^{3+}$  занимают позиции с локальной симметрией  $D_2$ . Для симметрии  $D_2$ , согласно [25], гамильтониан (1) имеет девять независимых параметров кристаллического поля  $B_q^k$ .

При нормальных условиях  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  имеет пространственную группу симметрии  $O_h^{10} (Ia3d)$  ( $a_0 = b_0 = c_0 = 12.0080 \text{ \AA}$ ) [26]. Ион празеодима замещает ион иттрия, который в ближайшем окружении имеет восемь ионов кислорода, расстояние до которых 2.303 и 2.438  $\text{ \AA}$ .

На основе структурных данных [26, 27] были вычислены суммы сферических тензоров  $\sum_b C_t^p(\Theta_b, \Phi_b)$  четных и нечетных рангов  $p$  по ближайшему окружению иона  $\text{Pr}^{3+}$ . Кроме того, структурные данные были использованы для определения параметров кристаллического поля

с нечетными рангами в модели обменных зарядов [28–30].

В приближении слабого (1) и промежуточного (2) конфигурационных взаимодействий удовлетворительного описания шарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в гранате получить не удалось. Приближение сильного конфигурационного взаимодействия (3) позволило заметно улучшить описание шарковских уровней. Но для мультиплетов  ${}^3F_4$  и  ${}^1G_4$  наблюдалось аномально большое отклонение рассчитанных значений энергии от экспериментальных.

Применение гамильтониана (4) позволило значительно улучшить описание шарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ . Стандартное среднеквадратичное отклонение  $\sigma$  в этом случае составило  $19.3 \text{ см}^{-1}$  (табл. 1), что на 37% меньше среднеквадратичного отклонения, полученного при описании уровней в приближении слабого конфигурационного взаимодействия.

Для уменьшения числа варьируемых параметров мы предполагали, что параметры кристаллического поля с нечетными рангами связаны с соответствующими параметрами кристаллического поля, полученными в модели обменных зарядов, множителем  $X_o$ , а параметры кристаллического поля с четными рангами связаны множителем  $X_e$  с параметрами, полученными в приближении слабого поля [12]. Таким образом, в качестве независимых варьируемых параметров при расчетах в приближении сильного конфигурационного взаимодействия по формуле (4) выступало семь параметров (табл. 2).

Введение дополнительных слагаемых в гамильтониан кристаллического поля (4) позволило улучшить описание шарковской структуры, но при этом параметры  $B_q^k$ , полученные в приближении слабого конфигурационного взаимодействия, остались практически неизменными (табл. 1).

Параметры кристаллического поля с нечетными рангами, полученные в результате описания экспериментальных значений шарковских уровней [12] в приближении сильного конфигурационного взаимодействия (4), отличаются на 15% от параметров, вычисленных нами в модели обменных зарядов (табл. 3). Таким образом, модель обменных зарядов может быть успешно применена для первичной оценки параметров кристаллического поля с нечетными рангами.

Следует обратить внимание на то, что значения варьируемых параметров  $\Delta_{c1}$  и  $\Delta_{c2}$  близки к энергиям мультиплетов  ${}^3F_4$  и  ${}^1G_4$ , описание которых в приближении слабого конфигурационного взаимодействия было неудовлетворительным. Описание мультиплета  ${}^3P_2$  улучшилось при введе-

**Таблица 2.** Параметры гамильтониана кристаллического поля

$X_e$	$X_o$	$\gamma_{\sigma f}$	$\gamma_{\pi f}$	$\Delta_{c1}, \text{см}^{-1}$	$\Delta_{c2}, \text{см}^{-1}$	$\Delta_d, \text{см}^{-1}$
1.021	1.178	-0.030	0.027	7382	10252	46012

**Таблица 3.** Параметры гамильтониана кристаллического поля с нечетными рангами, вычисленные в модели обменных зарядов (а) и в приближении сильного конфигурационного взаимодействия (б)

Приближение	$(B_2^3/\Delta_d) \times 10^4$	$(B_2^5/\Delta_d) \times 10^4$	$(B_4^5/\Delta_d) \times 10^4$
a	75	-522	347
b	88	-615	409

**Таблица 4.** Вклады возбужденной конфигурации  $4f^{N-1}5d$  и эффектов ковалентности в параметры интенсивности  $\Omega_k$

$\Omega_k \times 10^{20}, \text{см}^2$	Вклад $4f^{N-1}5d$	Эффект ковалентности	Результирующее значение
$\Omega_2$	0.019	0.644	0.883
$\Omega_4$	0.28	4.43	6.20
$\Omega_6$	9.94	0.31	8.16

**Таблица 5.** Силы осцилляторов абсорбционных переходов  ${}^3H_4 \rightarrow {}^{2S+1}L_J$  в приближении слабого (а) и сильного (б) конфигурационных взаимодействий

${}^{2S+1}L_J$	Энергия перехода, $\text{см}^{-1}$	Силы осцилляторов ( $\times 10^6$ )		
		эксперимент [10]	a	b
${}^3H_6$	4320	1.00	1.83	1.16
${}^3F_2$	5400	5.63	6.29	4.55
${}^3F_3$	6670	14.91	17.33	11.49
${}^3F_4$	7140	5.68	9.42	6.42
${}^1G_4$	9710	0.50	0.39	0.28
${}^1D_2$	16670	6.35	2.78	2.24
${}^3P_0$	20490	6.83	9.84	9.46
${}^1I_6 + {}^3P_1$	21280	15.58	13.98	14.98
${}^3P_2$	22120	27.56	9.90	27.58
$\sigma$			7.72	6.14

**Таблица 6.** Параметры интенсивности, полученные при описании экспериментальных сил осцилляторов [10] в приближении слабого (а) и сильного (б) конфигурационных взаимодействий

$\Omega_k \times 10^{20}, \text{см}^2$	a	b
$\Omega_2$	-2.046	0.0004
$\Omega_4$	13.212	7.05
$\Omega_6$	11.818	7.70

**Таблица 7.** Варьируемые параметры оператора силы линии

$O_{ck} \times 10^{10}$ , см			$O_{dk} \times 10^{10}$ , см			$\Delta_c$ , см <sup>-1</sup>	$\Delta_d$ , см <sup>-1</sup>
$O_{c2}$	$O_{c4}$	$O_{c6}$	$O_{d2}$	$O_{d4}$	$O_{d6}$		
-0.005	-0.016	0.106	-0.019	2.656	2.775	21 700	56510

нии параметра  $\Delta_d$ , задающего степень влияния конфигурации противоположной четности  $4f5d$ .

При описании штарковских уровней с помощью гамильтониана (4) было установлено, что возбужденная конфигурация  $4f5d$  наиболее сильно влияет на штарковскую структуру мультиплетов  $^1I_6$  и  $^3P_2$ , а эффекты ковалентности – на штарковское расщепление мультиплетов  $^3F_3$ ,  $^3F_4$ ,  $^1G_4$ . О сильном влиянии возбужденных конфигураций на отдельные группы мультиплетов уже сообщалось в работах [19, 31].

Используя значения параметров  $\gamma_{\sigma f}$ ,  $\gamma_{\pi f}$  (табл. 2) и  $B_2^3/\Delta_d$ ,  $B_2^5/\Delta_d$ ,  $B_4^5/\Delta_d$  (табл. 3), полученные при описании штарковской структуры мультиплетов, по формулам (9)–(12) были вычислены параметры интенсивностей  $\Omega_k$  (табл. 4).

Анализируя табл. 4, можно сделать вывод, что влияние эффектов ковалентности наиболее заметно для  $\Omega_4$ , а возбужденная конфигурация типа  $4f^{N-1}5d$  дает наибольший вклад в  $\Omega_6$ . Следовательно, эффекты ковалентности дают существенный вклад в параметры интенсивности наряду с вкладом возбужденной конфигурации противоположной четности.

В приближении слабого и сильного конфигурационных взаимодействий также было выполнено описание экспериментальных значений сил осцилляторов абсорбционных переходов [10] (табл. 5).

Приближение слабого конфигурационного взаимодействия (приближение Джадда–Офельта) позволило получить удовлетворительное описание экспериментальных значений сил осцилляторов, но параметр  $\Omega_2$ , полученный при этом (табл. 6), имеет отрицательное значение, что противоречит основным положениям теории.

**Таблица 8.** Экспериментальные и вычисленные времена жизни  $\tau$ , полученные в приближении слабого (а) и сильного (б) конфигурационных взаимодействий

Мультиплет	$\tau_{\text{expt}}$ , мкс	$\tau_{\text{calc}}$ , мкс	
		a	b
$^1D_2$	180.0	178.9	179.5
$^3P_0$	8.4	9.1	9.1
$^3P_1$	8.8	9.1	8.6

Для устранения данного противоречия были выполнены расчеты в приближении сильного конфигурационного взаимодействия (13). Стандартное среднеквадратичное отклонение  $\sigma$  уменьшилось на 20% по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия (табл. 5). Значения варьируемых параметров оператора силы линии (13) приведены в табл. 7.

На основе  $O_{dk}$  и  $O_{ck}$  были получены усредненные значения параметров интенсивности (табл. 6), которые согласуются с параметрами интенсивности, полученными другим методом (табл. 4). Это подтверждает существование корреляции между интенсивностями электрических дипольных переходов и тонкими деталями штарковской структуры мультиплетов.

Времена жизни мультиплетов  $\tau$ , полученные в приближении слабого и сильного конфигурационных взаимодействий, согласуются с экспериментальными значениями (табл. 8).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В приближении слабого и сильного конфигурационных взаимодействий выполнено описание штарковской структуры мультиплетов и сил осцилляторов абсорбционных переходов кристаллической системы  $\text{Pr}^{3+}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ . Наилучшее описание достигается в приближении сильного конфигурационного взаимодействия, в котором стандартное среднеквадратичное отклонение уменьшается на 37% для штарковского расщепления и на 20% для сил осцилляторов по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия.

Из описания штарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$  получены параметры ковалентности и параметры кристаллического поля с нечетными рангами, на основе которых вычислены параметры интенсивности. Вычисленные таким образом параметры интенсивности удовлетворительно согласуются с параметрами, полученными из описания экспериментальных значений сил осцилляторов абсорбционных переходов. Это подтверждает существование корреляции между тонкими деталями штарковской структуры мультиплетов и интенсивностями абсорбционных переходов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в кристалле  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ .

Параметры кристаллического поля с нечетными рангами, полученные в результате описания

штарковской структуры, находятся в удовлетворительном согласии с параметрами, вычисленными в модели обменных зарядов, что позволяет использовать модель обменных зарядов для предварительной оценки параметров кристаллического поля с нечетными рангами. Установлено, что конфигурации противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  и эффекты ковалентности дают сравнимый по величине вклад в интенсивности переходов  $f-f$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Rabinovitch Y., Tetard D., Faucher M.D., Pham-Thi M. // Opt. Mater. 2003. V. 24. P. 345.
- Lupei A., Lupei V. // Opt. Mater. 2003. V. 24. P. 181–189.
- Shen Y.R., Li C.M., Costa V.C., Bray K.L. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 014101.
- Gruber J.B., Sardar D.K., Yow R.M., Allik T.H., Zandi B. // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. № 6. P. 3050.
- Gruber J.B., Zandi B., Valiev U.V., Rakhimov Sh.A. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 115103.
- Gruber J.B., Nijjar A.S., Sardar D.K., Yow R.M., Russell C.C. III, Allik T.H., Zandi B. // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. P. 063519.
- Zhou S., Fu Z., Zhang J., Zhang S. // J. Luminesc. 2006. V. 118. P. 179.
- Hreniak D., Hölsä J., Lastusaari M., Stręk W. // J. Luminesc. 2007. V. 122–123. P. 91.
- Gruber J.B., Hills M.E., MacFarlane R.M., Morrison C.A., Turner G.A. // Chem. Phys. 1989. V. 134. № 2–3. P. 241.
- Malinowski M., Wolski R., Wolinski W. // Sol. St. Commun. 1990. V. 74. № 1. P. 17.
- Cheung Y.M., Gayen S.K. // Phys. Rev. B. 1993. V. 49. № 21. P. 14827.
- Moune O.K., Rabinovitch Y., Tétard D., Pham-Thi M., Lallier E., Faucher M.D. // Eur. Phys. J. D. 2002. V. 19. P. 275–291.
- Özen G., Forte O., Di Bartolo B. // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. P. 013510.
- Turos-Matysiak R., Zheng H.R., Wang J.W., Yen W.M., Meltzer R.S., Łukasiewicz T., Świrkowicz M., Grinberg M. // J. Luminesc. 2007. V. 122–123. P. 322–324.
- Kornienko A.A., Kaminskii A.A., Dunina E.B. // Phys. St. Sol. (b). 1990. V. 157. № 1. P. 267.
- Корниенко А.А., Дунина Е.Б., Янкевич В.Л. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. С. 27.
- Thorne J.R.G., Jones M., McCaw C.S., Murdoch K.M., Denning R.G., Khaidukov N.M. // J. Phys.: Cond. Matt. 1999. V. 11. P. 7851.
- Корниенко А.А., Каминский А.А., Дунина Е.Б. // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. В. 6. С. 2087.
- Faucher M.D., Tanner P.A., Mak C.S.K. // J. Phys. Chem. 2004. V. 108. P. 5278.
- Корниенко А.А., Дунина Е.Б. // Опт. и спектр. 2004. Т. 97. № 1. С. 75.
- Дунина Е.Б., Корниенко А.А., Каминский А.А. // ФТТ. 2006. Т. 48. № 5. С. 826.
- Корниенко А.А., Дунина Е.Б. // Письма в ЖЭТФ. 1994. Т. 59. № 6. С. 385.
- Фомичева Л.А., Корниенко А.А., Дунина Е.Б. // ЖТФ. 2007. Т. 77, № 10. С. 6.
- Гайдук М.И., Золин В.Ф., Гейгерова Л.С. Спектры люминесценции европия. М.: Наука, 1974. 195 с.
- Леушин А.М. Таблицы функций, преобразующихся по неприводимым представлениям точечных групп. М.: Наука, 1968. 142 с.
- Wyckoff R.W.G. Crystal Structures. London, 1951.
- Emiraliyev A., Kocharov A.G., Bakradze R.V., Karimov I., Akhmedzhanov Z.I. // Kristallografiya. 1976. V. 21. P. 112.
- Малкин Б.Э., Иваненко З.И., Айзенберг И.В. // ФТТ. 1970. Т. 12. С. 1874
- Malta O.L. // Chem. Phys. Lett. 1982. V. 87. P. 27.
- Старостин Н.В. // Физика и спектроскопия лазерных кристаллов/Под ред. Каминского А.А., Аминова Л.К., Ермолаева В.Л. и др. М.: Наука, 1986. С. 62.
- Faucher M.D., Moune O.K., Garsia D, Tanner P. // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. № 15. P. 9501.