

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО И РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ИОНА Ho^{3+} В ЛАЗЕРНЫХ СТЕКЛАХ

*Дунина Е.Б., доц., Корниенко А.А., проф.,
Григорьева М.В., студ., Васильева Л.Н., студ.*

*Витебский государственный технологический университет,
г. Витебск, Республика Беларусь*

Теллуридные стекла, активированные ионами Ho^{3+} , находят широкое применение как материалы для производства оптических фильтров, элементов памяти, оптоволоконных линий связи. В работе [1] выполнен синтез и детальное экспериментальное исследование интенсивностей полос поглощения таких стекол и было установлено, что описание интенсивностей некоторых полос в рамках традиционных теорий интенсивностей получается с низкой точностью. В данной работе для повышения точности описания предлагается более корректно учитывать пространственное распределение электронной плотности.

Свойства состояний редкоземельных ионов существенным образом зависят как от углового, так и радиального распределения электронной плотности. Угловое распределение электронной плотности определяется значениями спинового S , орбитального L и полного момента J . От углового распределения электронной плотности, прежде всего, зависят приведенные матричные элементы неприводимых тензоров $\langle \gamma [SL]J \| U^k \| \gamma' [S'L']J' \rangle$. Различие в радиальном распределении электронной плотности в разных состояниях учитывается более косвенно, так как в одноэлектронном приближении радиальная часть волновых функций одинаковая для всех состояний данной $4f^N$ – конфигурации.

Из теории водородоподобных атомов известно, что чем больше энергия состояния, тем большую радиальную протяженность имеет распределение электронной плотности. Проанализируем с этой точки зрения состояние 5G_5 иона Ho^{3+} . Вычисленная в работе волновая функция этого состояния состоит в основном из суперпозиции трех «чистых» мультиплетов:

$$\Psi({}^5G_5) = -0.70 \cdot {}^5G_5(27795) + 0.40 \cdot {}^3H_4(27795) + 0.26 \cdot {}^3H_3(60672).$$

В скобках указаны энергии мультиплетов в см^{-1} .

Присутствие компоненты с энергией 60672 см^{-1} свидетельствует о том, что пространственное распределение электронной плотности в состоянии 5G_5 имеет большую радиальную протяженность. По этой причине ион Ho^{3+} в этом состоянии будет сильно взаимодействовать с окружающими лигандами. Учет этой специфики электронного строения с помощью метода конфигурационного взаимодействия, предложенного в работе [2], приводит к уменьшению среднеквадратичного отклонения вычисленных сил осцилляторов от экспериментальных на 34 % по сравнению с традиционными теориями интенсивностей.

Список использованных источников

1. Laxmikanth, C. Luminescence and spectroscopic properties of $\text{ZnF}_2\text{-MO-TeO}_2$ glasses doped with Ho^{3+} ions / C. Laxmikanth, J. Anjaiah, P. Venkateswara Rao, B. Appa Rao, N. Veeraiah // J. Molecular Structure. – 2015. – Vol. 1093. – P. 166–171.
2. Dunina, E.B. Influence of Excited Configurations on the Intensities of Electric_Dipole Transitions of Rare_Earth Ions / E. B. Dunina and A. A. Kornienko // Optics and Spectroscopy. – 2014. – Vol. 116. – No. 5. – P. 706–711.