

# ВЛИЯНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ НА ШТАРКОВСКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ МУЛЬТИПЛЕТОВ ИОНА Tb<sup>3+</sup> В МОНОКРИСТАЛЛЕ YAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>

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

Белорусский государственный университет информатики и  
радиоэлектроники, Минск, Беларусь

\* Витебский государственный технологический университет,  
Витебск, Беларусь

Описание штарковской структуры кристаллического поля монокристалла YAl<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, активированного Tb<sup>3+</sup>, выполнено с помощью модифицированной теории кристаллического поля, в которой учтено влияние возбужденных конфигураций противоположной четности и эффектов ковалентности. Вычислены параметры четного и нечетного кристаллического поля и параметры ковалентности.

Для описания штарковской структуры мультиплетов в приближении слабого конфигурационного взаимодействия обычно используют гамильтониан:

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

Для описания штарковских уровней кристаллических систем, у которых влияние возбужденных конфигураций аномально сильное, используют гамильтониан [1, 2]:

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

Величину вкладов возбужденной конфигурации противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  в  $\tilde{G}_q^k$  оценивают по формуле [1, 2]:

$$\tilde{G}_q^k(d) = -\frac{2k+1}{2\langle f \| C^k \| f \rangle} \sum_{p',p''} \sum_{t',t''} (-1)^q \begin{pmatrix} p' & p'' & k \\ t' & t'' & -q \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} p' & p'' & k \\ f & f & d \end{pmatrix} \langle f \| C^{p'} \| d \rangle \langle d \| C^{p''} \| f \rangle \frac{B_{t'}^{p'}(d)}{\Delta_d} \frac{B_{t''}^{p''}(d)}{\Delta_d} \quad (3)$$

где  $B_{t'}^{p'}(d)$ ,  $B_{t''}^{p''}(d)$  – параметры кристаллического поля нечетной симметрии.

Величину вкладов в  $\tilde{G}_q^k$  от процессов с переносом заряда определяют выражением [1, 2]:

$$\tilde{G}_q^k(c) = \sum_b \tilde{J}^k(b) C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b). \quad (4)$$

Для расчета параметров  $\tilde{J}^k(b)$  используют приближенные выражения [1, 2]:

$$\begin{cases} \tilde{J}^2(b) \approx \frac{5}{28} [2\gamma_{\sigma f}^2 + 3\gamma_{\pi f}^2] \\ \tilde{J}^4(b) \approx \frac{3}{14} [3\gamma_{\sigma f}^2 + \gamma_{\pi f}^2] \\ \tilde{J}^6(b) \approx \frac{13}{28} [2\gamma_{\sigma f}^2 - 3\gamma_{\pi f}^2] \end{cases} \quad (5)$$

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

В  $YAl_3(BO_3)_4$  ион  $Tb^{3+}$  занимает позиции с локальной симметрией  $D_3$ . При такой симметрии в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия кроме шести параметров кристаллического поля четной симметрии  $B_0^2$ ,  $B_0^4$ ,  $B_3^4$ ,  $B_0^6$ ,  $B_3^6$  и  $B_6^6$  дополнительно появляются шесть параметров нечетного кристаллического поля  $C_0^1$ ,  $C_0^3$ ,  $C_3^3$ ,  $C_0^5$ ,  $C_3^5$ , параметры  $\Delta_{ci}$ , соответствующие энергии конфигурации с переносом заряда, и параметр  $\Delta_d$ , соответствующий конфигурации противоположной четности, а также параметры ковалентности  $\gamma_{\sigma f}$  и  $\gamma_{\pi f}$ .

Описание штарковских уровней иона  $Tb^{3+}$ , приведенных в работе [3], было выполнено в приближении слабого и аномально сильного конфигурационного взаимодействия. Результаты расчетов показали, что наилучшего описания удастся достичь в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия.

Полученные результаты позволяют утверждать, что необходимо учитывать как влияние конфигураций противоположной четности, так и влияние конфигураций с переносом заряда.

В результате описания штарковских уровней иона тербия получены параметры четного и нечетного кристаллического поля и параметры ковалентности, что имеет большое значение для описания оптических характеристик кристаллов.

#### Список литературы

1. A.A. Kornienko, E.B. Dunina, L.A. Fomicheva, *Optics and Spectroscopy*, **116**, 739-746, (2014)
2. E.B. Dunina, A.A. Kornienko, L.A. Fomicheva, *Central European Journal of Physics*, **6**, 407-414, (2008).
3. N.Ben Amar, M.A. Hassairi, M. Dammak, *Journal of Luminescence*, **173**, 223-230, (2016).