

РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИОНА Pr^{3+} В ЛАЗЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ

К. О. ВОРОНЦОВА

НАУЧНЫЕ РУКОВОДИТЕЛИ – Е. Б. ДУНИНА, КАНДИДАТ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК, ДОЦЕНТ,
А. А. КОРНИЕНКО, ДОКТОР ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК, ПРОФЕССОР

В данной статье описано прикладное программное обеспечение, предназначенное для вычисления параметров Джадда-Офеля на основе экспериментальных данных спектров поглощения материалов, активированных ионом празеодима. Искомые параметры находятся путем минимизации функционала ошибки, который представляет собой сумму квадратов отклонений рассчитанных сил линий от их экспериментально измеренных значений.

Ключевые слова: лазерные материалы; редкоземельные элементы; теория Джадда-Офеля; сила линий.

Актуальность исследования материалов, активированных редкоземельными ионами, обусловлена их востребованностью в лазерной технике, волоконно-оптических линиях связи и нелинейной оптике. Особое внимание уделяется трехвалентному празеодиму, который выделяется на фоне других редкоземельных ионов довольно простой электронной оболочкой ($4f^2$) и наличием многочисленных оптических переходов в широкой спектральной области. В связи с этим в настоящей работе в качестве иона-активатора выбран празеодим.

Цель проекта – разработать приложение для расчета параметров интенсивности Джадда-Офеля, используя экспериментальные данные из спектров поглощения материалов, легированных ионом празеодима.

Для выполнения данного программного продукта были использованы следующие технологии: интегрированная среда разработки Visual Studio, система управления базами данных MySQL, язык программирования C#.

При вычислении силы линий электрических дипольных переходов в приложении используется выражение, полученное Джаддом и Офелем. Сила линии межмультиплетных электрических дипольных переходов выражается как сумма параметров интенсивности и квадратов приведенных матричных элементов:

$$S_{JJ'}^{ED} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \left\langle \gamma[LS]J \left\| U^k \right\| \gamma[L'S']J' \right\rangle^2, \quad (1)$$

где e – заряд электрона.

Пользователь имеет возможность вводить экспериментальные данные из базы данных или вручную, заполняя соответствующие таблицы на форме. Кроме этого можно выполнить расчет, используя экспериментальные данные по силам линий или силам осцилляторов, учесть при необходимости суммирование уровней и использовать процедуру минимизации. Для определения параметров интенсивности используется процедура минимизации функционала ошибки, составленного из суммы квадратов отклонений вычисленных сил линий от соответствующих экспериментальных значений. Полный набор результатов выводится в новую форму или текстовый файл.

С помощью разработанного приложения были выполнены расчеты с использованием четырех наборов экспериментальных данных по стеклам [1] на основе свинцового боротеллуриата с добавлением Pr^{3+} .

Библиографические ссылки

1. Effect of alkali/alkaline modifiers on Pr^{3+} ions doped lead boro-tellurite glasses for lasing material applications / M. K. Komal Poojha, K. A. Naseer, P. Matheswaran [et al.] // J. Optical Materials. 2023. № 143. P. 114289–114299.