

НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

ОПИСАНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ АБСОРБЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ПРАЗЕОДИМА В ТЕЛЛУРИДНЫХ СТЕКЛАХ В РАЗЛИЧНЫХ ПРИЛИЖЕНИЯХ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Бруева К.В. (2 курс, конструкторско-технологический факультет)

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент Дунина Е.Б.

УО “Витебский государственный технологический университет”

Состав теллуридных стекол можно выразить формулой $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3 - \text{TiO}_2 - \text{Na}_2\text{O}$. Присутствие в составе теллуридного стекла ионов W^{6+} приводит к образованию тетрагональных WO_4 и октаэдрических WO_6 структурных единиц. Наличие этих структурных групп обуславливает нелинейные оптические свойства стекол. Благодаря нелинейно-оптическим свойствам становятся возможными многие процессы, например, такие как апконверсионные механизмы накачки излучением 800 нм от диодного лазера. Энергетический спектр Pr^{3+} в этом стекле обеспечивает конструирование лазеров, работающих в диапазоне 446–1940 нм. Поэтому теллуридные стекла, активированные ионами Pr^{3+} являются перспективными активными средами для твердотельных лазеров и усилителей в оптоволоконных технологиях. По этой причине в работе [1] выполнен детальный экспериментальный и теоретический анализ интенсивностей абсорбционных переходов иона Pr^{3+} в теллуридном стекле. При этом было выяснено, что стандартная теория (приближение Джадда-Офелта [2,3])

$$S_{JJ'}^{ed} = e^2 \sum_k \Omega_k \left\langle 4f^N SLJ \left\| U^k \right\| 4f^N S'L'J' \right\rangle^2 \quad (1)$$

не в состоянии корректно воспроизводить экспериментальные результаты. Здесь $S_{JJ'}^{ed}$ -- сила линии электрического дипольного перехода, e -- заряд электрона, Ω_k -- параметры интенсивности, $\left\langle 4f^N SLJ \left\| U^k \right\| 4f^N S'L'J' \right\rangle$ -- матричные элементы неприводимых тензоров.

В связи с этим в данной работе выполнен расчет интенсивностей абсорбционных переходов в теллуридных стеколах, активированных ионами Pr^{3+} , с помощью теории, учитывающей более корректно влияние возбужденных конфигураций.

Сначала было выполнено описание интенсивностей абсорбционных переходов по формуле (1) или в приближении слабого конфигурационного приближения. Так же как в [1] результаты расчета плохо согласовывались с экспериментом. Поэтому второй вариант расчета был выполнен по модифицированной теории в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия [4]

$$S_{JJ'}^{ed} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \underbrace{\left[1 + 2R_k (E_{\gamma J} + E_{\gamma' J'} - 2E_f^0) \right]}_{\tilde{\Omega}_k} \left\langle \gamma J \left\| U^k \right\| \gamma' J' \right\rangle^2, \quad (2)$$

где $E_{\gamma J}$, $E_{\gamma' J'}$ -- энергии мультиплетов, включенных в переход, R_k -- дополнительные параметры, обусловленные возбужденными конфигурациями, E_f^0 -- энергия центра тяжести $4f$ -конфигурации. Чтобы понизить число варьируемых параметров и повысить надежность их определения из экспериментальных данных мы воспользовались следующим допущением $R_2 = R_4 = R_6 = \alpha$. В этом приближении точность описания значительно повысилась. Особенно это касается интенсивности перехода $^3H_4 \rightarrow ^3P_2$. Мультиплет 3P_2 , обладает наибольшей энергией среди наблюдаемых мультиплетов, поэтому влияние возбужденных конфигураций на него наибольшее. В формуле (1) различие во влиянии возбужденных конфигураций на разные

мультиплеты не учитывается. Поэтому описание по формуле (1) не дает удовлетворительных результатов.

Для того чтобы сделать вывод о наиболее адекватной формуле для описания интенсивностей абсорбционных переходов, третий вариант расчета был выполнен в приближении сильного конфигурационного взаимодействия [5] с одним варьируемым параметром в качестве энергии возбужденной конфигурации. Точность описания лишь незначительно улучшилась в сравнении с приближением промежуточного конфигурационного приближения (формула (2)).

Таким образом учет влияния возбужденных конфигураций позволяет значительно повысить точность описания интенсивностей абсорбционных переходов иона Pr^{3+} в теллуридном стекле $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3 - \text{TiO}_2 - \text{Na}_2\text{O}$.

Список использованных источников

1. Lakshminarayana, G. Photoluminescence of Pr^{3+} -, Nd^{3+} - and Ni^{2+} -doped $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3 - \text{TiO}_2 - \text{Na}_2\text{O}$ glasses / G.Lakshminarayana, H.Yang, J.Qiu // J. Alloys Compd. – 2009. – Vol. 475. – P. 569-576.
2. Judd, B.R. Optical Absorption Intensities of Rare-Earth Ions / B.R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750-761.
3. Ofelt, G.S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G.S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol.37, №3. – P. 511-520.
4. Kornienko, A.A. Dependence of the line strength of $f-f$ transitions on the manifold energy. II. Analysis of Pr^{3+} in $\text{KPrP}_4\text{O}_{12}$ / A.A. Kornienko, A.A. Kaminskii, E.B. Dunina // Phys. Stat. Sol.(b). – 1990. – Vol. 157, № 1. – P. 267-273.
5. Корниенко, А.А. Теория интенсивностей электрических дипольных переходов в приближении сильного конфигурационного взаимодействия / А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина, В.Л. Янкевич В.Л. // Опт. и спектр. – 1996. – Т.80. – С. 871-874.

ВСПЫШКА КОМЕТЫ 17P/HOLMES

Виноградова М. А. (2 курс, физический факультет)

Научный руководитель: Голубев В.А.

УО “Витебский государственный университет имени П.М. Машерова”

В конце октября всеобщее внимание привлекла вспышка блеска кометы 17P/Holmes. 4 мая 2007 года она прошла перигелий на расстоянии 2 а.е. и начала удаляться от центрального светила, постепенно уменьшая и без того слабый блеск (16^m). Но 24 октября периодическая комета неожиданно увеличила яркость, в результате чего стала видна невооружённым глазом.

Сравнивая эфемеридные значения видимой звездной величины и наши наблюдения, рассчитаем по формуле Погсона соответствующее увеличение освещённости:

$$\frac{E_1}{E_2} = 2,512^{m_2 - m_1} = 2,512^{16,5 - 2,4} = 4 \cdot 10^5,$$

где E_1 и m_1 – освещённость и видимая звёздная величина во время вспышки, E_2 и m_2 – вычисленные освещённость и видимая звёздная величина. Таким образом, во время вспышки освещённость увеличилась в 400 000 раз.

Оценим массу пылевой компоненты. Зная, что спектр кометы был практически непрерывным, предположим, что весь блеск давала пылевая компонента.

Светимость ядра кометы можно вычислить по формуле:

$$L = \frac{AL_0\pi R^2}{4\pi r^2}; \quad \frac{L}{L_0} = 2,512^{M_0 - M},$$

где L_0 – светимость Солнца.

Предполагая, что ядро рассеивает свет изотропно, можем использовать формулу, связывающую видимую и абсолютную звёздные величины с расстоянием:

$$M = m + 5 - 5 \lg r,$$

где r выражено в парсеках. Получим выражение для оценки радиуса светящейся части кометы:

$$R = \frac{2r}{\sqrt{A}} \cdot 2,512^{0,5(M_0 - m - 5 \lg A)},$$

где M_0 – абсолютная звёздная величина Солнца ($M_0 = 4,8^m$), A – альбеда кометы (мы приняли его равным 4%).

Полученное значение $R = 8800$ км, тогда площадь этой части