

Литература

1. Токталиев П. Д., Мартыненко С. И. *Математическая модель системы охлаждения камер сгорания авиационных прямоточных двигателей на эндотермических топливах* // Вестн. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 1. С. 83–97.

2. Токталиев П. Д., Бабкин В. И., Мартыненко С. И. *Моделирование сопряжённого теплообмена в элементах конструкции системы охлаждения авиационных двигателей на эндотермических топливах* // Тепловые процессы в технике. 2015. Т. 7, № 4, С. 162–165.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЭЛЕМЕНТАМИ С НЕЗАПОЛНЕННОЙ f -ОБОЛОЧКОЙ

Л.А. Фомичева¹, Е.Б. Дунина², А.А. Корниенко²

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь
Fomicheva_L_A@mail.ru

² Витебский государственный технологический университет, Витебск, Беларусь
L.Dun@mail.ru

При описании экспериментальных данных по штарковскому расщеплению элементов с незаполненной f -оболочкой используется теория кристаллического поля. Лантаноиды и актиноиды имеют сходную электронную структуру. Подобие в электронных переходах и оптических спектрах $4f$ - и $5f$ -элементов позволяет создавать единые теоретические модели для описания их спектроскопических свойств. На сегодняшний день существует различные подходы к описанию кристаллических систем, активированных f -элементами. Но поскольку, ни одна из теорий не позволяет дать полного совпадения с экспериментом, работы по созданию новых теорий актуальны и востребованы. Нами разработана математическая модель [1, 2], позволяющая получить оптические свойства кристаллических систем, легированных элементами с незаполненной f -оболочкой, на основе экспериментальных данных по штарковской структуре. В данной теории учтено аномально сильное влияние конфигураций противоположной четности и конфигурации с переносом заряда. Гамильтониан кристаллического поля в этом случае имеет вид:

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

Здесь Δ_d — энергия возбужденной конфигурации противоположной четности; Δ_{ci} — энергия конфигурации с переносом заряда.

Расчеты в рамках предложенной модели приводят к значительному улучшению согласия теории с экспериментом. Кроме того, в результате расчетов определяются параметры кристаллического поля нечетной симметрии и параметры ковалентности, на основе которых можно вычислить параметры интенсивностей $f - f$ переходов.

Литература

1. Dunina E. B., Kornienko A. A., Fomicheva L. A. *Modified theory of f - f transition intensities and crystal field for systems with anomalously strong configuration interaction* // Central European Journal of Physics. 2008. Vol. 6. P. 407–414.

2. Fomicheva L., Dunina E., Kornienko A. *Description of Stark structure of the elpasolites $Cs_2NaPrCl_6$, Cs_2NaYCl_6 and Cs_2NaYBr_6* // Universal Journal of Physics and Application. 2013. Vol. 1. P. 98–104.