

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КОВАЛЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ШТАРКОВСКИХ УРОВНЕЙ ИОНА Tm^{3+} В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ $KLu(WO_4)_2$

Фомичева Л.А., Корниенко А.А.*, Дунина Е.Б.*, Прусова И.В. **

Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, Минск, Беларусь

* Витебский государственный технологический университет,
Витебск, Беларусь

** Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

Выполнено описание шарковской структуры мультиплетов иона Tm^{3+} в $KLu(WO_4)_2$ с помощью модифицированного гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия. На основе выполненных расчетов определены параметры ковалентности.

В работе выполнено описание шарковской структуры Tm^{3+} в $KLu(WO_4)_2$. При нормальных условиях кристалл $KLu(WO_4)_2$ имеет пространственную группу симметрии $C2/c$ ($a=10.576 \text{ \AA}$, $b=10.2144 \text{ \AA}$, $c=7.487 \text{ \AA}$) [1]. В $KLu(WO_4)_2$ ион Tm^{3+} занимает позиции с локальной симметрией $C2$. Среди параметров кристаллического поля при точечной симметрии $C2$ имеются мнимые, что усложняет теоретические расчеты. Шарковскую структуру иона Tm^{3+} в этом случае можно успешно описать, используя симметрию $C2v$ или $D3h$. В данной работе вычисления проводились в рамках симметрии $C2v$. Для симметрии $C2v$ в приближении слабого конфигурационного взаимодействия гамильтониан

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

имеет девять параметров кристаллического поля четной симметрии, при вычислении в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [2,3]

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

к этим параметрам добавляется еще шесть параметров кристаллического поля нечетной симметрии, параметры Δ_{ci} , соответствующие энергии конфигурации с переносом заряда, параметр Δ_d , соответствующий конфигурации противоположной четности, а также параметры ковалентности γ_{cf} и $\gamma_{\pi f}$. Описание экспериментальных данных [4] в приближении слабого, промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия не позволило получить хорошего согласия теории с экспериментом. Поэтому были выполнены расчеты в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия (2). С помощью гамильтониана (2) для $KLu(WO_4)_2: Tm^{3+}$ удалось уменьшить среднеквадратичное отклонение на 32% по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия. Кроме того, на основе экспериментальных данных по шарковской структуре были получены параметры кристаллического поля нечетной симметрии и параметры ковалентности.

Расчеты показали, что модифицированная теория кристаллического поля (2) более точно описывает шарковскую структуру по сравнению со стандартной теорией и при этом позволяет получить параметры ковалентности.

1. M.C. Pujol, A. Aznar, X. Mateos et al., *Journal of Applied Crystallography*, **39**, №2, 230-236, (2006).
2. E.B. Dunina, A.A. Kornienko, L.A. Fomicheva, *Central European Journal of Physics*, **6**, 407-414, (2008).
3. A.A. Kornienko, E.B. Dunina, L.A. Fomicheva, *Optics and Spectroscopy*, **116**, 683-690, (2014)
4. M.C. Pujol, C. Cascales, M. Aguilo and F. Diaz, *J. Phys.: Cond. Matter.*, **20**, 345219 (9pp), (2008).