

**ВЛИЯНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ НА ШТАРКОВСКОЕ
РАСЩЕПЛЕНИЕ МУЛЬТИПЛЕТОВ ИОНА Tb³⁺
В МОНОКРИСТАЛЛЕ YAl₃(VO₃)₄**

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 YAl₃(VO₃)₄, активированного Tb³⁺, 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 γ_{if} ($i = \sigma, \pi$) – параметры ковалентности, соответствующие перескоку электрона из i -оболочки лиганда в f -оболочку лантаноида.

В $YAl_3(VO_3)_4$ 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 Δ_{ci} , соответствующие энергии конфигурации с переносом заряда, и параметр Δ_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. А.А. Kornienko, Е.В. Dunina, L.A. Fomicheva, *Optics and Spectroscopy*, **116**, 739-746, (2014)
2. Е.В. Dunina, А.А. 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).