

### Учет аномально сильного конфигурационного взаимодействия при описании штарковской структуры мультиплетов иона $\text{Pr}^{3+}$ в $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$

Фомичева Л.А.<sup>1</sup>, доцент; Дунина Е.Б.<sup>2</sup>, доцент;  
Корниенко А.А.<sup>2</sup>, профессор

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет информатики и  
радиоэлектроники, г. Минск

<sup>2</sup> Витебский государственный технологический университет, г. Витебск

Выполнено описание штарковской структуры мультиплетов иона  $\text{Pr}^{3+}$  в  $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$  с помощью модифицированного гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия:

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

Здесь  $E_J$ ,  $E_{J'}$  – энергия мультиплетов;  $G_q^k$  – параметры, обусловленные межконфигурационным взаимодействием,  $\Delta$  – энергия возбуждённой конфигурации.

При нормальных условиях кристалл  $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$  имеет пространственную группу симметрии  $C2/c$  ( $a = 10.652\text{\AA}$ ,  $b = 10.374\text{\AA}$ ,  $c = 7.582\text{\AA}$ ). В  $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$  ион  $\text{Pr}^{3+}$  занимает позиции с локальной симметрией  $C2$ . Среди параметров кристаллического поля при точечной симметрии  $C2$  имеются мнимые, что усложняет теоретические расчеты. Штарковскую структуру иона  $\text{Pr}^{3+}$  в этом случае можно успешно описать, используя симметрию  $C2v$  или  $D3h$ . В данной работе вычисления проводились в рамках симметрии  $C2v$ .

Результаты расчетов показали, что с помощью модифицированного гамильтониана удастся улучшить описание штарковской структуры по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия. Кроме того, на основе экспериментальных данных по штарковской структуре были получены параметры кристаллического поля нечетной симметрии и параметры ковалентности.