

АНАЛИЗ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СОСТОЯНИЙ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ИОНА

А.А. Корниенко¹, Е.Б. Дунина¹, Л.А. Фомичева², М.В. Григорьева¹

¹ Витебский государственный технологический университет, Витебск

² Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники, Минск

E-mail: a_a_kornienko@mail.ru; L.Dun@mail.ru; Famichova@mail.ru

Для описания интенсивностей полос поглощения лазерных материалов, активированных редкоземельными ионами, практически без исключения применяют теорию Джадда-Офельта [1, 2], в которой силу линии электрического дипольного перехода можно вычислить по формуле:

$$S_{JJ'}^{ED} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \langle \gamma[SL]J \| U^k \| \gamma'[S'L']J' \rangle^2, \quad (1)$$

где Ω_k – параметры интенсивности, $\langle \gamma[SL]J \| U^k \| \gamma'[S'L']J' \rangle$ – матричные элементы неприводимых тензоров U^k .

Формула (1) справедлива при выполнении следующих условий:

1. конфигурация f^N полностью вырождена;
2. полностью вырождена каждая возбужденная конфигурация;
3. энергетический зазор между конфигурацией f^N и любой возбужденной конфигурацией много больше энергии уровней включенных в переход.

Условие 3 выполняется только для ионов Ce^{3+} и Yb^{3+} . Однако явное противоречие в применении теории Джадда-Офельта обнаруживается только для материалов, активированных ионами Pr^{3+} . Хотя при внимательном изучении более чем полувекового опыта применения теории Джадда-Офельта можно найти многочисленные случаи описания интенсивностей абсорбционных переходов с недопустимо низкой точностью и для других ионов.

Для объяснения условий применимости различных вариантов теории интенсивностей в данной работе выполнен расчет волновых функций состояний редкоземельных ионов Pr^{3+} , Tm^{3+} , Nd^{3+} , Er^{3+} и сделан вывод, что степень влияния конфигурационного взаимодействия зависит не только от энергетического зазора до возбужденной конфигурации, но и от электронного строения состояния.

Волновые функции состояний с $J = 2$ иона Pr^{3+} приведены в таблице 1.

Таблица 1

Волновые функции состояний с $J=2$ иона Pr^{3+}

Приближенное обозначение состояния	Энергия, см^{-1}	Коэффициенты функции при компонентах $^{2S+1}L_J$		
		3F_2	1D_2	3P_2
$[^3F_2]$	4689	0.9871	0.1595	-0.0149
$[^1D_2]$	15763	0.1576	-0.9504	0.2681
$[^3P_2]$	21684	0.0286	-0.2670	-0.9633

Из-за спин-орбитального взаимодействия волновая функция получается в виде суперпозиции различных термов ^{2S+1}L с одинаковым J . Традиционно эти состояния обозначают $^{2S+1}L_J$ по компоненте с наибольшим по модулю коэффициентом и часто называют мультиплетом.

Из таблицы 1 видно, что состояние 3P_2 слабо связано с другими состояниями – недиагональные компоненты много меньше диагональных. Вследствие малого энергетического зазора до возбужденных конфигураций на состояние 3P_2 сильнее, чем на другие состояния будет действовать конфигурационное взаимодействие, учесть которое можно по одной из теорий [3]. Другая ситуация наблюдается для состояний иона Tm^{3+} (см. табл. 2).

Таблица 2

Волновые функции состояний с $J=4$ иона Tm^{3+}

Приближенное обозначение состояния	Энергия, см^{-1}	Коэффициенты функции при компонентах $^{2S+1}L_J$		
		3F_4	3H_4	1G_4
$[^3F_4]$	5538	0.7868	-0.2851	0.5474
$[^3H_4]$	12475	0.5300	0.7666	-0.3626
$[^1G_4]$	21025	-0.3162	0.5754	0.7542

Жирным курсивом выделены коэффициенты важные с точки зрения анализа электронного строения состояния. Все состояния содержат недиагональные компоненты сравнимые с диагональными по абсолютной величине. Следовательно, все состояния, приведенные в таблице 2, сильно взаимосвязаны между собой и конфигурационное взаимодействие через состояние 1G_4 будет передаваться на состояния 3F_4 , 3H_4 . Выполненные нами расчеты по теории [3] с учетом конфигурационного взаимодействия подтверждают этот вывод – улучшение описания одновременно достигается для всех состояний из таблицы 2.

1. Judd B.R. // Phys. Rev. 1962. Vol. 127, № 3. P. 750–761.
2. Ofelt G.S. // J. Chem. Phys. 1962. Vol. 37, № 3. P. 511–520.
3. Dunina E.B., Kornienko A.A., Fomicheva L.A. // Cent. Eur. J. Phys. 2008. Vol. 6, № 3. P. 407–414.