

регулятор отношений), а так же ускоряет процесс создания программ на базе программируемых логических контроллеров.

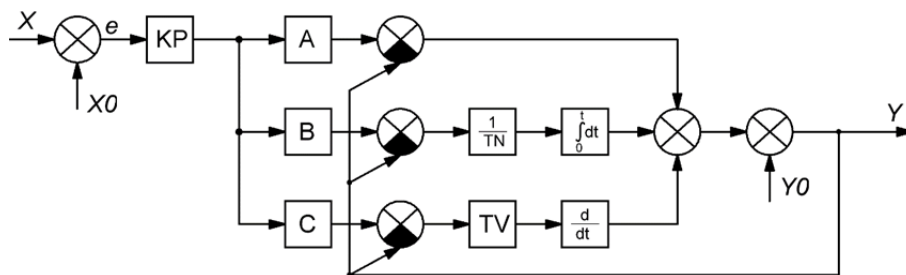


Рисунок 5 – Структурная схема ПИД-регулятора с весовыми коэффициентами A, B, C при уставке

Данная работа проводится в рамках разработки учебного курса «Микротехнологии в автоматизированных системах» в проекте «Innovative ICT Education for Social-Economic Development (IESED)» Европейской Комиссии, в рамках программы «ERASMUS +».

УДК 539.21:535

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ИНТЕНСИВНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ ИОНА ДИСПРОЗИЯ В БОРАТНЫХ СТЕКЛАХ

Тестова А.Д., студ., Дунина Е. Б., доц., Корниенко А. А., проф.

*Витебский государственный технологический университет,
г. Витебск, Республика Беларусь*

Реферат. Выполнено моделирование влияния возбужденных конфигураций на интенсивностные характеристики поглощения и люминесценции иона Dy^{3+} в боратных стеклах. Установлено, что взаимосогласованное описание сил осцилляторов абсорбционных переходов и времени жизни метастабильного состояния ${}^4F_{9/2}$ можно получить только в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия.

Ключевые слова: боратные стекла, ион диспрозия, модифицированная теория Джадда-Офельта.

Обычно неорганические стекла, которые классифицируют как аморфные вещества, имеют ряд важных преимуществ по сравнению с кристаллическими или полимерными материалами. К таким важным свойствам относятся: высокая оптическая прозрачность, широкая область рабочих температур, простые условия синтеза, изготовление образцов различной формы, однородность люминесцентных характеристик, высокая механическая стабильность. Среди различных оптических материалов на основе оксидных стекол, боратные стекла (B_2O_3), активированные редкоземельными ионами вызвали интерес исследователей возможными технологическими приложениями такими как твердотельные лазеры, оптические оптоволоконные усилители, сцинтилляторы и дозиметры радиации.

В работе [1] экспериментально исследованы оптические свойства боратных стекол, активированных ионами Dy^{3+} . Эти стекла эффективно поглощают ультрафиолетовое излучение и на переходе ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^6H_{13/2}$ излучают желтый свет, на переходе ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^6H_{15/2}$ – голубой, на ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^6H_{11/2}$ – красный, что делает их привлекательными для создания светодиодных источников белого света. Применение теории Джадда-Офельта [2,3] для описания интенсивностных характеристик поглощения и люминесценции оказалось проблематичным – вычисленное время жизни мультиплета ${}^4F_{9/2}$ получилось меньше экспериментально измеренного, что в принципе не должно быть, так как кроме спонтанного излучения существует еще много процессов, которые уменьшают время жизни. В связи с этим в данной работе выполнено моделирование влияния конфигурационного взаимодействия на интенсивностные характеристики поглощения и излучения согласно методике, разработанной в работе [4].

Основные характеристики оптических переходов, такие как вероятности спонтанных переходов, силы осцилляторов переходов, время жизни возбужденного состояния, выражаются через силу линий межмультиплетных переходов. В приближении слабого конфигурационного взаимодействия (теория Джадда-Офельта) для силы линий электрических дипольных межмультиплетных переходов справедлива простая формула:

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

Здесь Ω_k – параметры интенсивности, $\langle \gamma[SL]J \| U^k \| \gamma'[S'L']J' \rangle$ – матричные элементы неприводимых тензоров U^k , вычисленные на волновых функциях в приближении свободного иона.

Запрет на f-f переходы частично снимается благодаря влиянию возбужденных конфигураций. Это влияние в формуле (1) учитывается только в минимальной степени. Поэтому применение формулы (1) для систем с сильным влиянием возбужденных конфигураций часто не обеспечивает необходимой точности описания экспериментальных результатов, а иногда даже противоречиво.

Более детально влияние возбужденных конфигураций можно учесть, применив приближение промежуточного конфигурационного взаимодействия [4,5]:

$$S_{JJ'}^{ED} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \underbrace{[1 + 2R_k(E_J + E_{J'} - 2E_f^0)]}_{\tilde{\Omega}_k} \langle \gamma J \| U^k \| \gamma' J' \rangle^2. \quad (2)$$

Здесь R_k – параметры, обусловленные конфигурационным взаимодействием. В этом приближении параметры $\tilde{\Omega}_k$ зависят по линейному закону от энергии E_J и $E_{J'}$ мультиплетов, включенных в переход, E_f^0 – энергия центра тяжести $4f^N$ – конфигурации.

Таблица 1 – Экспериментальные и вычисленные по формулам (1–3) силы осцилляторов иона Dy^{3+} в боратных стеклах

Переход ${}^6H_{15/2} \rightarrow {}^{2S+1}L_J$	E_J см ⁻¹	$f_{\text{expt}} \times 10^6$ [1]	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ (1)	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ (3)	$f_{\text{CALC}} \times 10^6$ (2)
${}^6H_{11/2}$	5920	3.377	3.095	3.187	3.332
${}^6F_{11/2} + {}^6H_{9/2}$	7750	6.778	6.706	6.731	6.783
${}^6F_{9/2} + {}^6H_{7/2}$	9090	6.862	6.643	7.128	6.881
${}^6H_{5/2} + {}^6F_{7/2}$	10990	6.656	6.512	6.475	6.599
${}^6F_{5/2}$	12450	3.157	3.361	3.213	3.349
${}^6F_{3/2}$	13320	0.598	0.639	0.604	0.630
${}^4F_{9/2}$	21100	0.525	0.482	0.415	0.433
${}^4I_{15/2}$	22170	1.698	1.277	1.068	1.064
${}^4G_{11/2}$	23470	0.544	0.104	0.106	0.100
${}^4I_{13/2} + {}^4F_{7/2}$	25820	1.792	1.837	1.615	1.602
${}^6P_{5/2} + {}^4I_{11/2}$	27250	1.798	2.449	1.879	1.998
${}^6P_{7/2}$	28360	4.711	4.808	4.659	4.746
δ_{RMS}			0.467	0.380	0.349
$\tau({}^4F_{9/2}), \text{ мкс}$		728	490	609	783
Параметры					
$\Omega_2 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			3.048	2.146	2.238
$\Omega_4 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			2.802	3.609	2.853
$\Omega_6 \times 10^{20}, \text{ см}^2$			6.950	6.878	7.147
$\alpha \times 10^4, \text{ см}$				-0.064	
$R_2 \times 10^4, \text{ см}$					-0.673
$R_4 \times 10^4, \text{ см}$					-0.005
$R_6 \times 10^4, \text{ см}$					-0.059

Примечание: δ_{RMS} – среднеквадратичное отклонение.

В специальных случаях, когда определяющее влияние оказывает только одна возбужденная конфигурация, например, конфигурация противоположной четности $4f^{N-1}5d$, формулу (2) можно упростить

$$S_{JJ'}^{ED} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k [1 + 2\alpha(E_J + E_{J'} - 2E_f^0)] \left(\gamma J \| U^k \| \gamma' J' \right)^2. \quad (3)$$

Здесь четыре варьируемых параметра – Ω_2 , Ω_4 , Ω_6 и α . Результаты описания абсорбционных переходов по формулам (1–3) представлены в таблице.

Прежде всего, следует отметить, что более детальный учет конфигурационного взаимодействия по формулам (2–3) приводит к уменьшению среднеквадратичного отклонения на 19–25 % по сравнению с описанием по формуле (1). Как и следовало ожидать [6] возбужденные конфигурации наиболее сильно воздействуют на высоко лежащие мультиплеты, такие как ${}^6P_{5/2}$, ${}^4I_{11/2}$. В теории Джадда-Офельта [2,3] именно для этих мультиплетов получается наибольшее разногласие с экспериментом.

Оптимальные значения параметров R_2 , R_4 , R_6 имеют одинаковый знак, но они существенно отличаются по величине друг от друга, Это свидетельствует о том, что наряду с возбужденными конфигурациями противоположной четности $4f^{N-1}5d$ существенное влияние на интенсивностные характеристики поглощения и излучения оказывают и возбужденные конфигурации с переносом заряда.

Кардинальное различие в результатах описания экспериментальных данных по формулам (1–3) заметно при сравнении вычисленного времени жизни возбужденного состояния ${}^4F_{9/2}$. В теории Джадда-Офельта (1) вычисленное (излучательное) время жизни меньше экспериментального. Это противоречие снимается только в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия при моделировании по формуле (2).

Таким образом, в оксидных боратных стеклах влияние возбужденных конфигураций на интенсивностные характеристики поглощения и излучения достаточно сильное. В случае иона Dy^{3+} взаимосогласованное описание сил осцилляторов абсорбционных переходов и времени жизни метастабильного уровня можно получить только при учете конфигурационного взаимодействия по формуле (2).

Список использованных источников

1. Lakshminarayana, G. Effect of alkali/mixed alkali metal ions on the thermal and spectral characteristics of $Dy^{3+}:B_2O_3-PbO-Al_2O_3-ZnO$ glasses / G. Lakshminarayana, S.O. Baki, A. Lira, U. Caldino, A.N. Meza-Rocha, I.V. Kityk, A.F. Abas, M.T. Alresheedi, M.A. Mahdi // J. Non-Crystalline Solids. – 2018. – Vol. 481. – P. 191-201.
2. Judd, B.R. Optical absorption intensities of rare-earth ions / B.R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750-761.
3. Ofelt, G.S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G.S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol.37, №3. – P. 511-520.
4. Dunina, E.B. Influence of Excited Configurations on the Intensities of Electric_Dipole Transitions of Rare_Earth Ions / E. B. Dunina and A. A. Kornienko // Optics and Spectroscopy. – 2014. – Vol. 116, No. 5. – P. 706–711.
5. Dunina, E.B. Modified theory of f-f transition intensities and crystal field for systems with anomalously strong configuration interaction/ E.B. Dunina, A.A. Kornienko, L.A. Fomicheva// Cent. Eur. J. Phys.–2008. – Vol. 6, №3.–P. 407-414.
6. Дунина, Е. Б. Влияние конфигурационного взаимодействия редкоземельных ионов на интенсивности их межмультиплетных переходов / Е. Б. Дунина, Л. А. Фомичева, А. А. Корниенко, М. В. Григорьева // ЖПС. – 2018. – Т. 85, №3. – С. 398–406.