

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования «Витебский государственный технологический университет»

УДК 548

№ ГР 20140988

Инв № _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе



Е.В. Ванкевич

“21” декабря 2015 г.

ОТЧЕТ

О научно-исследовательской работе

*Разработка методов определения параметров межконфигурационного взаимодействия и параметров пространственного распределения электронной плотности наноструктурированных материалов, активированных редкоземельными ионами, по их оптическим спектрам
201 -ГБ 307*

(Заключительный)

Научный руководитель

А.А.Корниенко

18.12.2015

Начальник НИЧ


С.А.Беликов

Витебск, 2015г.



СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ


Научный руководитель
доктор физ.-мат. наук,
профессор, г.н.с

15.12.2015 
дата, подпись

Корниенко Алексей
Александрович
(Введение, заключение, Раздел 8)


Исполнители:

кандидат физ.-мат. наук,
доцент, в.н.с.

15.12.2015 
дата, подпись

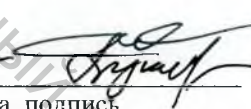
Дунина Елена
Брониславовна
(Раздел 2,3,5)

кандидат физ.-мат. наук,
с.н.с.

15.12.2015 
дата, подпись

Фомичёва Людмила
Александровна
(Раздел 4,6, 7)

н.с.

15.12.2015 
дата, подпись

Букин Юрий Алексеевич
(Раздел 1)

Нормоконтролёр

15.12.2015 
дата, подпись

Ринейский Константин
Николаевич



РЕФЕРАТ

Отчет 113с., 37 табл., 2 рисунка, 74 источника.

ГОЛЬМИЙ, СМЕШАННЫЕ ЛИТИЙ-КАЛИЕВЫЕ ФОСФАТНЫЕ СТЕКЛА, $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$, ХРОМ, ТЕРБИЙ, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, ИНТЕНСИВНОСТИ АБСОРБЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ, КОНФИГУРАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Объектом исследования являются кристаллы $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Cs}_2\text{NaGdCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{NaHoBr}_6$, $\text{Cs}_2\text{NaHoCl}_6$ и стекла различного состава, активированные ионами трехвалентного гольмия, европия, тербия и самария.

Цель работы – установить значимость влияния возбужденных конфигураций на спектроскопические характеристики иона гольмия, европия, тербия и самария в стеклах различного состава и монокристаллах $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Cs}_2\text{NaGdCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{NaHoBr}_6$, $\text{Cs}_2\text{NaHoCl}_6$. При этом будут решены следующие задачи: сделан вывод о наиболее адекватном приближении для описания экспериментальных результатов, определены параметры межконфигурационного взаимодействия для ионов европия, тербия и самария и по оптическим спектрам определены параметры пространственного распределения электронной плотности для ионов гольмия и тербия.

Установлено, что для иона гольмия, европия, тербия и самария более адекватный учет конфигурационного взаимодействия приводит к уменьшению среднеквадратичного отклонения вычисленных сил осцилляторов от экспериментальных на 45 – 98% по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия. Таким образом, обычная практика применения приближения слабого конфигурационного взаимодействия для этих ионов кажется неоправданной.

Предсказываемые по разным теориям интенсивностей каналы люминесценции отличаются только для мультиплета 5S_2 иона гольмия в кристалле $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$. Сделан вывод о благоприятном канале генерации лазерного излучения в кристалле $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$, активированном ионами гольмия.

Впервые по оптическим спектрам определены параметры пространственного распределения электронной плотности (параметры ковалентности) $\gamma_{\sigma f}$, $\gamma_{\pi f}$ для иона гольмия и тербия в кристаллах с локальной кубической симметрией.

По результатам моделирования спектра ионов Cr^{3+} установлено, что «красные» линии в спектре люминесценции люминофоров на основе иттрий алюминиевого граната принадлежат ионам хрома, образующим два разных типа оптических центров. Для каждого оптического центра определены параметры кристаллического расщепления $10Dq$ и параметры тригонального искажения.

Разработаны основные принципы модели передачи энергии между оптическими центрами на основе редкоземельных ионов.

Выдвинута гипотеза о том, что из-за специфики пространственного распределения электронной плотности в некоторых мультиплетах иона европия эти мультиплеты аномально сильно взаимодействуют с возбужденными конфигурациями с переносом заряда от лигандов ближайшего окружения. Без учета этого взаимодействия не возможно адекватно описать интенсивностные характеристики излучения и поглощения. Модель, разработанная авторами проекта согласно этой гипотезе, успешно применена учеными из Туниса и Испании для описания экспериментальных данных (T.Koubaa, M.Dammaka, M.C.Pujol, M.Aguilo, F.Diaz. Optical spectroscopy of Eu^{3+} ions doped in $\text{KLu}(\text{WO}_4)_2$ single crystals // Journal of Luminescence 168 (2015) 7–13).

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	6
1 Влияние конфигурационного взаимодействия на интенсивностные характеристики поглощения иона гольмия в лазерных фосфатных стеклах	7
1.1 Основные принципы теории интенсивностей.....	8
1.2 Расчет спектроскопических характеристик иона гольмия в лазерных фосфатных стеклах.....	14
2 Предсказание люминесцентных характеристик иона гольмия в двойных вольфраматах.....	21
3 Теоретическое изучение оксифлюоридных стекол, активированных европием.....	28
4 Определение параметров межконфигурационного взаимодействия и параметров ковалентности по оптическим спектрам иона гольмия в оксидных кристаллах.....	33
4.1 Выводы по разделам 1-4	46
5 Природа «красных» центров в фосфорах на основе итрий алюминиевых гранатов.....	49
5.1 Моделирование расщепления термов 3d-конфигурации в кристаллическом поле симметрии C_{3v}	50
5.2 Результаты моделирования и сравнение с экспериментом.....	65
6 Влияние возбужденных конфигураций на силы линий абсорбционных переходов иона тербия в оксидных кристаллах	68
7 Определение параметров ковалентности иона Tb^{3+} в эльпасолитах методами оптической спектроскопии.....	71
7.1 Расчет волновых функций $J=9$ и $J=10$, преобразующихся по неприводимым представлениям группы O_h	72
7.2 Расчет матричных элементов неприводимых единичных тензоров для конфигурации $4f^8$	79
7.3 Определение параметров ковалентности по оптическим спектрам.....	94

8 Анализ интенсивностей абсорбционных переходов иона Sm^{3+} в лазерных стеклах с учетом конфигурационного взаимодействия.....	98
Заключение	103
Список использованных источников.....	105

Витебский государственный технологический университет