

РАЗДЕЛ 3. ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

3.1 Математика и информационные технологии

УДК 535.375.51

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИОНОВ С $4f^2$ КОНФИГУРАЦИЕЙ В СТЕКЛАХ

Дунина Е.Б., доц., Лепешкина Ю.С., студ., Савочкина В.Г., студ.

Витебский государственный технологический университет,
г. Витебск, Республика Беларусь

Реферат. Выполнено описание сил осцилляторов абсорбционных переходов иона празеодима в фосфатном стекле ($40\%PbO - 60\%P_2O_5$) двумя способами: по схеме Джадда-Офельта и по модифицированной теории Джадда-Офельта. Сравнение результатов расчета показало, что влияние возбужденных конфигураций противоположной четности на мультиплеты иона празеодима существенно и его учет в модифицированной теории позволяет значительно улучшить описание перехода ${}^3H_4 \rightarrow {}^3P_2$, а также уменьшить среднеквадратичное отклонение почти в три раза.

Ключевые слова: фосфатные стекла, сила осцилляторов, сила линии, редкоземельные ионы, конфигурационное взаимодействие.

К актуальным задачам лазерной физики относится как поиск новых лазерных материалов, активированных редкоземельными (РЗ) ионами, так и дальнейшее исследование спектрально-люминесцентных характеристик уже известных лазерных сред. Расширение знаний о характеристиках $f-f$ оптических переходов РЗ-ионов открывает новые пути применения уже известных лазерных материалов при создании квантовых генераторов.

Положение энергетических уровней РЗ-иона, интенсивность линий в спектрах поглощения и люминесценции зависят от особенностей кристаллического окружения примесного иона. Известно, что для сверхчувствительных переходов величина их интенсивности может существенно отличаться в различных соединениях. При этом именно они часто являются лазерными переходами, либо переходами, участвующими в процессе накачки при получении лазерной генерации. При описании интенсивностей абсорбционных переходов по схеме Джадда-Офельта для иона Pr^{3+} для сверхчувствительного перехода ${}^3H_4 \rightarrow {}^3P_2$ почти во всех лазерных материалах экспериментальное значение силы осциллятора значительно больше, предсказываемого теорией. Это связано с тем, что данная схема расчета не учитывает тот факт, что мультиплет 3P_2 имеет большую энергию и находится вблизи нижних состояний возбужденной конфигурации противоположной четности ${}^4f^{N-1}5d$. Поэтому их влияние на этот мультиплет более существенно, чем на другие нижележащие мультиплеты.

В настоящей работе, с целью показать, что учет влияния возбужденной конфигурации существенно улучшает описание оптических свойств иона, в качестве объекта исследования выбран ион Pr^{3+} в фосфатном стекле ($40\%PbO - 60\%P_2O_5$).

Безразмерная величина $f_{JJ'}$, называемая силой осциллятора перехода, определяется через силу линии перехода $S_{JJ'}$ следующим образом:

$$f_{JJ'} = \frac{8\pi^2 mc\sigma}{3(2J+1)he^2} \left[\frac{(n^2+2)^2}{9n} S_{JJ'}^{ed} + nS_{JJ'}^{md} \right]. \quad (1)$$

Здесь сила линии магнитных дипольных переходов $S_{JJ'}^{MD}$ несущественно зависит от лигандов окружения и вычисляется по известной формуле

$$S_{J'}^{md} = \frac{e^2 h^2}{16\pi^2 m^2 c^2} \langle \gamma [LS] J \| \bar{L} + 2\bar{S} \| \gamma' [L'S'] J' \rangle^2. \quad (2)$$

Сила линии электрических дипольных переходов по схеме Джадда-Офельта определяется выражением [1,2]

$$S_{JJ'}^{ed} = e^2 \sum_{k=2,4,6} \Omega_k \langle \gamma J \| U^k \| \gamma' J' \rangle^2, \quad (3)$$

где U^k – неприводимый тензор ранга k ($k=2,4,6$), вычисленный на функциях мультиплет в приближении свободного редкоземельного иона.

Для учета влияния возбужденной конфигурации противоположной четности $4f^{N-1}5d$, для силы линий использовалось выражение [3]

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

содержащее четыре варьируемых параметра $\Omega_2, \Omega_4, \Omega_6$ и α . В этом случае параметры $\hat{\Omega}_k$ зависят по линейному закону от энергии E_J и $E_{J'}$ мультиплетов, включенных в переход.

Для определения параметров интенсивности в схемах расчета (3) и (4) использовалась процедура минимизации функционала ошибки, составленного из суммы квадратов отклонений вычисленных сил осцилляторов от соответствующих экспериментальных значений. Следует отметить, что параметры интенсивности $\Omega_2, \Omega_4, \Omega_6$ должны принимать положительные значения. В качестве критерия выбора наиболее адекватной схемы параметризации выступало минимальное значение среднеквадратичного отклонения

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{J'} (f_{JJ'}^{\text{exp}} - f_{JJ'}^{\text{calc}})^2}{N - N_p}}, \quad (5)$$

где N – количество экспериментальных сил осцилляторов $f_{JJ'}^{\text{exp}}$, N_p – количество независимых параметров, определяющих теоретические значения сил осцилляторов $f_{JJ'}^{\text{calc}}$.

Следует отметить, что вычисления для схемы (3) можно проводить в среде системы компьютерной математики MAPLE. Функция *fit* в пакете *with(stats)* может обеспечивать регрессию для функции нескольких переменных. Параметры приближающей функции выбираются по критерию минимума среднеквадратической ошибки. К сожалению, в случае зависимости (4), функция *fit* неприменима. При попытке ее проведения возвращается структура процедуры, а не результат регрессии.

Результаты описания сил осцилляторов абсорбционных переходов иона Pr^{3+} в фосфатном стекле [4] по формулам (1), (3) и (1), (4) представлены в таблице.

Учет конфигурационного взаимодействия приводит к уменьшению среднеквадратичного отклонения от 3,529 до 1,213. Как и следовало ожидать, наиболее сильно с возбужденными конфигурациями взаимодействует мультиплет 3P_2 . Сила осциллятора для перехода ${}^3H_4 \rightarrow {}^3P_2$ вычисленная по формулам (1),(4) составила 13,024, что говорит о хорошем согласии с экспериментальным значением 13,630.

Таблица – Экспериментальные и вычисленные значения сил осцилляторов абсорбционных переходов иона Pr^{3+} в фосфатном стекле.

Поглощение с уровня ${}^3H_4 \rightarrow$	Энергии переходов, 10^4 см^{-1}	$f_{JJ'}^{\text{exp}}$ [4]	$f_{JJ'}^{\text{calc}}$ по формуле	
			D-O (1),(3)	(1),(4)
3F_2	0,512	3,930	3,389	2,584
3F_3	0,650	8,030	10,637	7,400
3F_4	0,688	3,050	6,489	5,174
1G_4	0,983	0,540	0,367	0,375
1D_2	1,691	2,930	1,980	3,181
3P_0	2,082	3,320	3,927	3,409
${}^3P_1+{}^1I_6$	2,136	6,480	6,064	6,889
3P_2	2,249	13,630	6,258	13,024
$\Omega_2 \times 10^{20}, \text{см}^2$			0,110	7,644
$\Omega_4 \times 10^{20}, \text{см}^2$			5,976	4,544
$\Omega_6 \times 10^{20}, \text{см}^2$			9,863	18,243
$\alpha \times 10^4, \text{см}$				0,252
			3,529	1,213

Таким образом, возбужденные конфигурации оказывают сильное влияние на силы осцилляторов $f-f$ переходов иона Pr^{3+} в фосфатном стекле и только при учете конфигурационного взаимодействия можно получить удовлетворительное описание экспериментальных результатов.

Список использованных источников

1. Judd, B.R. Optical absorption intensities of rare-earth ions / B.R. Judd // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750-761.
2. Ofelt, G.S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G.S. Ofelt // J. Chem. Phys. – 1962. – Vol.37, №3. – P. 511-520.
3. Kornienko, A.A. Dependence of the line strength of $f-f$ transitions on the manifold energy. II. Analysis of Pr^{3+} in $\text{KPrP}_4\text{O}_{12}$ / A.A. Kornienko, A. A. Kaminskii, E.B. Dunina // Phys. Stat. Sol.(b). – 1990. – Vol. 157, № 1. – P. 267-273.
4. Mitra, S. Intense orange emission in Pr^{3+} doped lead phosphate glass / S. Mitra, S. Jana // J. of Phys. And Chem. Of Solids – 2015. – Vol. 85. – P. 245-253.

УДК 621.3.084.2

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОЕМКОСТНОГО МЕТОДА И ЕМКОСТНЫХ ДАТЧИКОВ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ, СОВРЕМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

**Германенко А., студ., Бурлаченко Д., студ., Гончаров Д., студ.,
Джежора А.А., д.т.н., доц., Завацкий Ю.А., ст. преп.**

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

Для неразрушающего контроля целого ряда полимерных материалов широко используются ЭП. Исходной информацией при решении задач неразрушающего контроля состава и структуры, диагностики прочностных и деформационных свойств, служит комплекс электрических характеристик. В случаях, когда к объектам контроля возможен только односторонний доступ, используют МНИК. Общие принципы проектирования многоканальных FEF sensors хорошо развиты. В данной работе рассмотрены принципы проектирования МЭНИК и ЗСНИК. Дан анализ характеристик, таких как глубина зоны