

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

УДК 548

№ ГР 20090851

Инв № _____

«УТВЕРЖДАЮ»
Проректор по научной работе



О Т Ч Е Т

О научно-исследовательской работе
«Расчет оптических центров Ln-ионов в синтезируемых люминофорах»

2010-Г/Б №370__

Заключительный

Научный руководитель

Начальник НИС

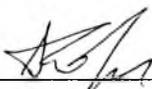
А.А.Корниенко

С.А.Беликов

Витебск, 2010г.

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

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



дата, подпись
21.12.2010

Корниенко Алексей
Александрович
(Введение, заключение)

Исполнители:

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



дата, подпись
21.12.2010

Дунина Елена
Брониславовна
(Раздел 1-2)

С.н.с.



дата, подпись
21.12.2010

Фомичёва Людмила
Александровна
(Раздел 3-4)

М.н.с.



дата, подпись
21.12.2010

Волков Игорь
Николаевич
(Раздел 1)

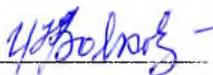
Лаборант



дата, подпись
21.12.2010

Бруева Кристина
Владимировна
(Раздел 1)

Нормоконтролёр



дата, подпись
21.12.2010

Волков Игорь
Николаевич

РЕФЕРАТ

Отчет 64 с., 2ч., 27 табл., 43 источника.

ЖЕЛЕЗО, ЛЮМИНОФОРЫ, ГРАНАТЫ, КВАРЦЕВОЕ СТЕКЛО, ИОНЫ ТЕРБИЯ, ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРАЗЕОДИМ, ЕВРОПИЙ, ХАНТИТ, ТЕЛЛУРИДНЫЕ СТЕКЛА, ИНТЕНСИВНОСТИ, КОНФИГУРАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ,

Объектом исследования являются оптические центры FeO_4 и FeO_6 в гранатах $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ и оптические центры в кварцевых стеклах, активированных ионами Tb^{3+} , теллуридные стекла, активированные ионами празеодима, хантит самоактивированный ионами европия и кристаллы La_2O_3 , активированные ионами празеодима.

Цель работы – установить оптимальный метод описания экспериментальных данных по спектрам возбуждения люминесценции, предсказание возможных каналов поглощения из возбужденного состояния в хантите и описание кристаллического расщепления мультиплетов; с помощью расчетов на основе микроскопической модели установить порядок величины расщепления вырожденных уровней в оптических центрах FeO_4 и FeO_6 спин-орбитальным взаимодействием и вычислить коэффициенты ветвления люминесценции с мультиплета $^5\text{D}_3$ иона Tb^{3+} в кварцевом стекле.

В результате исследования установлено, при расщеплении терма ^4G иона железа совместным действием кристаллического поля и спин-орбитального взаимодействия возникают уровни, переходы с которых могут обеспечить появление трех максимумов в наблюдаемой «красной» полосе люминесценции. Таким образом, роль ионов Fe нельзя исключать в образовании «красной» полосы люминесценции.

Результаты расчетов показывают, что при возбуждении ультрафиолетовым излучением, кварцевые стекла, активированные ионами Tb^{3+} , являются эффективными преобразователями ультрафиолетового излучения в излучение инфракрасного диапазона.

Для описания интенсивностных характеристик излучения и поглощения и для описания кристаллического расщепления мультиплетов в оксидных лазерных материалах применена новая теория интенсивностей и теория кристаллического поля, учитывающие аномально сильное влияние возбужденных конфигураций на некоторые мультиплеты.

Показано, что влияние возбужденных конфигураций существенно, и без корректного учета конфигурационного взаимодействия невозможно получить непротиворечивое описание экспериментальных результатов по оптической спектроскопии с удовлетворительной точностью.

Применение модифицированной теории интенсивностей и теории кристаллического поля к системе Pr_2O_3 позволило разработать новую методику определения параметров пространственного распределения электронной плотности и параметров кристаллического поля нечетной симметрии по данным оптической спектроскопии о штарковском расщеплении мультиплетов.

СОДЕРЖАНИЕ

ЧАСТЬ 1. РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ЦЕНТРОВ Ln-ИОНОВ В СИНТЕЗИРУЕМЫХ ЛЮМИНОФОРАХ.....	6
Введение.....	6
1 Составление компьютерных программ для расчета энергии уровней оптических центров на основе Ln ³⁺ -ионов и ионов группы железа в люминофорах.....	7
1.1 Краткая теория кристаллического поля для d-элементов	7
1.2 Текст программы на «MAPLE» для расчета уровней энергии	10
2 Оптимизация вычисленных уровней энергии с экспериментальными в оптических центрах на основе Ln ³⁺ -ионов и ионов группы железа.....	17
3 Составление компьютерных программ для расчета интенсивности спектральных линий оптических центров на основе Ln ³⁺ -ионов	20
3.1 Краткие теоретические основы.....	20
3.2 Избранные модули программы на «Фортране»	22
4 Оптимизация вычисленных интенсивностей спектральных линий с экспериментальными значениями для оптических центров на основе Ln ³⁺ -ионов в люминофорах.....	27
Заключение	31
Список использованных источников в первой части	32
ЧАСТЬ 2. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЕТВЛЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ТРЕХ ВАЛЕНТНЫХ ЛАНТАНОИДОВ В ЛЮМИНОФОРАХ.....	36
Введение ко второй части	36
5 Расчет сил осцилляторов абсорбционных переходов иона Pr ³⁺ в теллуридных стеклах	38
5.1 Водные замечания к расчету сил осцилляторов.....	38
5.2 Экспериментальные значения интенсивностей абсорбционных	

переходов иона Eu^{3+} хантите.....	39
5.3 Основные теоретические положения	42
4.4 Обсуждение результатов моделирования абсорбционных переходов в хантите	44
5.5 Обсуждение результатов моделирования абсорбционных переходов в теллуридных стеклах в различных приближениях теории интенсивностей.....	46
6 Расчет коэффициентов ветвления люминесценции иона Pr^{3+} в теллуридных стеклах.....	49
6.1 Краткие выводы по результатам расчета интенсивностей	51
7 Расчет энергетического спектра Pr_2O_3 в приближении слабого конфигурационного взаимодействия.....	53
7.1 Основные формулы теории кристаллического поля в приближении слабого и аномально сильного конфигурационного взаимодействия	53
7.2 Описание штарковского расщепления в приближении слабого конфигурационного взаимодействия	55
8 Расчет энергетического спектра Pr_2O_3 в приближении сильногоконфигурационного взаимодействия	58
Заключение	61
Список использованных источников.....	62

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Lakshminarayana, G. Photoluminescence of Pr^{3+} -, Nd^{3+} - and Ni^{2+} - doped TeO_2 – ZnO – WO_3 – TiO_2 – Na_2O glasses / G.Lakshminarayana, H.Yang, J.Qiu // J. Alloys Compd. – 2009. – Vol. 475. – P. 569-576.
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. Собельман, И.И. Введение в теорию атомных спектров / И.И. Собельман. – М., Физматгиз, 1963. – 640 с.
5. Спектры люминесценции европия / М.И. Гайдук [и др.]. – М.: Наука, 1974. – 195 с.
6. Зависимость силы линий электрических дипольных $f-f$ переходов от энергии мультиплетов иона Pr^{3+} в YAlO_3 / Дунина Е.Б. [и др.] // ФТТ.– 1990.– Т.32, № 5.– С. 1568-1570.
7. Корниенко, А.А. Теория интенсивностей межмультиплетных электрических дипольных переходов в приближении сильного конфигурационного взаимодействия / А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина, В.Л. Янкевич // Опт. и спектр. – 1996. – Т.80, №6. – С. 951-955.
8. Kornienko, A.A. Dependence of the line strength of $f-f$ transitions on the manifold energy. I. Projector on the basis of nonorthogonal functions / A.A. Kornienko, A.A. Kaminskii, E.B.Dunina // Phys. Stat. Sol.(b).– 1990.– Vol.157, №1.– P. 261-266.
9. Дунина, Е.Б. Корреляция между интенсивностями межмультиплетных электрических дипольных переходов и тонкими деталями штарковской структуры мультиплетов иона Pr^{3+} в LaCl_3 / Е.Б.Дунина, А.А.Корниенко, А.А.Каминский // ФТТ. – 2006. –Т. 48, № 5. – С. 826-830.
10. Moune, O.K. Electronic transitions, crystal field analysis and anomalous levels

- splittings in the optical spectrum of Pr^{3+} in La_2O_3 and Pr_2O_3 / O.K. Moune [et al] // J. Lumin., 1999, V.85, p. 59-70
11. Корниенко, А.А. Зависимость штарковской структуры от энергии мультиплетов / А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина // Письма в ЖЭТФ, 1994, Т.59. №6, с. 385-388
 12. Корниенко, А.А. Влияние межконфигурационного взаимодействия на кристаллическое поле Ln^{3+} -ионов / А.А. Корниенко, А.А. Каминский, Е.Б. Дунина // ЖЭТФ, 1999, Т.116, №6, с. 2087-2102
 13. 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, V. 6, №3, p. 407-414
 14. Корниенко, А.А. Определение параметров интенсивности по тонким деталям штарковской структуры энергетического спектра иона Tm^{3+} в $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ / А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина // Опт. и спектр., 2004, Т.97, №1, с. 75-82
 15. Satyanarayana, T. Fluorescence features of Tm^{3+} ions in $\text{PbO-Sb}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$ glass ceramics / T. Satyanarayana [et al] // Physica B, 2010, V. 405, P. 1872-1880
 16. El Okr, M. Spectroscopic studies of the Pr^{3+} -doped borovanadate glass / M. El Okr // J. Alloys Compounds 2010. V. 490. P. 184-189
 17. Бруева, К.В. Компьютерное моделирование интенсивностей абсорбционных переходов наноконплексов $\text{KY}(\text{MoO}_4)_2:\text{Pr}^{3+}$ / К.В. Бруева, Е.Б. Дунина. // Тезисы докладов XLIII научно-технической конференции преподавателей и студентов университета / УО «ВГТУ». – Витебск, 2010. – С.194
 18. Ларионова, Н.Н. Определение параметров кристаллического поля иона Pr^{3+} в кристаллах La_2O_3 и Pr_2O_3 с помощью теоретических моделей / Н.Н. Ларионова, Л.А. Фомичева, А.А. Корниенко. // «Новые направления приборостроения». Материалы 3-й Международной студенческой научно-технической конференции. 21-23 апреля 2010 года. Минск, БНТУ. – 2010.

С. 185.

19. Бруева, К.В. Описание сил осцилляторов абсорбционных переходов системы $KY(MoO_4)_2:Pr^{3+}$ / К.В. Бруева, Е.Б. Дунина, А.А. Корниенко. // «Новые направления приборостроения». Материалы 3-й Международной студенческой научно-технической конференции. 21-23 апреля 2010 года. Минск, БНТУ. – 2010. С. 190.
20. Бруева, К.В. Сравнительный анализ интенсивностей абсорбционных переходов трехвалентного празеодима в теллуридных стеклах / К.В. Бруева. // Физика конденсированного состояния: материалы XVIII респ. науч. конф. аспирантов, магистрантов и студентов. (Гродно, 21-23 апр. 2010 г., ГрГУ им. Я. Купалы; редкол.: Е.А. Ровба (отв. ред.) [и др.]. – Гродно: ГрГУ, 2010. С. 18-20.
21. Фомичева, Л.А. Описание штарковского расщепления мультиплетов иона Pr^{3+} в кристаллах La_2O_3 и Pr_2O_3 / Л.А. Фомичева, А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина. // Веснік Віцебскага дзяржаўнага ўніверсітэта. 2010г. №5(59), с. 21-24
22. Корниенко, А.А. Компьютерное моделирование характеристик интенсивности поглощения и люминесценции иона Pr^{3+} в оксидных системах / А. А. Корниенко, Е. Б. Дунина, Л. А. Фомичева. // Квантовая электроника: материалы VIII Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 22-25 нояб. 2010 г. / редкол.: М.М. Кугейко (отв. ред.) [и др.]. – Минск: Изд. центр БГУ, 2010. – С. 55.