

## ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ИОНОВ НЕОДИМА И ПРАЗЕОДИМА И АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

**Корниенко А.А.<sup>1</sup>, проф., Дунина Е.Б.<sup>1</sup>, доц.,**

**Фомичева Л.А.<sup>2</sup>, доц., Прусова И.В.<sup>3</sup>, доц.**

<sup>1</sup> *Витебский государственный технологический университет,  
г. Витебск, Республика Беларусь*

<sup>2</sup> *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
г. Минск, Республика Беларусь*

<sup>3</sup> *Белорусский национальный технический университет,  
г. Минск, Республика Беларусь*

Реферат. В статье выполнен расчет волновых функций ионов  $Nd^{3+}$  и  $Pr^{3+}$  в лазерных материалах в приближении «свободного иона». На основе сравнительного анализа этих функций сформулирована гипотеза, объясняющая почему теория Джадда-Офельта достаточно хорошо применима к лазерным материалам, активированным ионами неодима, и мало применима к материалам с примесью празеодима.

Ключевые слова: теория Джадда-Офельта, конфигурационное взаимодействие, волновые функции ионов  $Nd^{3+}$  и  $Pr^{3+}$ .

Для описания интенсивностей полос поглощения и расчета спектроскопических характеристик лазерных материалов, активированных редкоземельными ионами, практически без исключения, применяют теорию Джадда-Офельта [1,2]

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

Здесь  $S_{JJ'}^{ED}$  – сила линий электрических межмультиплетных дипольных переходов,  $\Omega_k$  – параметры интенсивности,  $\langle \gamma J \| U^k \| \gamma' J' \rangle$  – матричные элементы неприводимых тензоров  $U^k$ .

Эта теория привлекает исследователей своей простотой. Она содержит всего три варьируемых параметра, которые часто называют параметрами интенсивности. Простота теории обусловлена главными допущениями:

- Основная и возбужденные конфигурации полностью вырожденные;
- Энергетический зазор между основной и возбужденной конфигурацией много больше энергии мультиплетов, включенных в переходы.

Второе предположение выполняется только для абсорбционных переходов с основного на низколежащие мультиплеты и не выполняется для переходов на высоколежащие мультиплеты ни для одного  $Ln^{3+}$  иона. Тем не менее, теорию Джадда-Офельта уже более пятидесяти лет применяют для описания интенсивностей полос поглощения и расчета спектроскопических характеристик лазерных материалов, активированных  $Ln^{3+}$  ионами. Довольно быстро было установлено и подтверждается многократно в современных исследованиях, что теория Джадда-Офельта не применима к ионам  $Pr^{3+}$  и  $Eu^{3+}$ .

В данной работе на примере сравнительного анализа волновых функций ионов  $Nd^{3+}$  и  $Pr^{3+}$  сформулирована гипотеза, объясняющая, почему теория Джадда-Офельта достаточно хорошо применима к лазерным материалам, активированным ионами неодима, и мало применима к материалам с примесью празеодима.

Волновые функции вычислялись в приближении «свободного иона» на основе решения уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{so} + \hat{H}' \quad (3)$$

где  $\hat{H}_e$  – включает электростатическое взаимодействие электронов с ядром и друг с другом.

Разложение электростатического взаимодействия через полиномы Лежандра позволяет разделить угловую и радиальную часть. В результате матричные элементы  $\hat{H}_e$  можно записать через четыре параметра  $E_0, E_1, E_2, E_3$  следующим образом

$$H_e = \sum_{k=0}^3 e_k E^k \quad (4)$$

Матричные элементы гамильтониана спин-орбитального взаимодействия  $\hat{H}_{SO}$  вычисляются по формуле

$$\begin{aligned} \langle l^N \gamma SLJM | \hat{H}_{SO} | l^N \gamma' S' L' J' M' \rangle = & \zeta_{nl} (-1)^{S'+L+J} \delta(JJ') \delta(MM') \begin{Bmatrix} S & S' & 1 \\ L & L' & J \end{Bmatrix} \times \\ & \times \sqrt{l(l+1)(2l+1)} \langle l^N \gamma SLJ || V^{11} || l^N \gamma' S' L' J' \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Гамильтониан  $\hat{H}'$  учитывает действие возбужденных конфигураций и имеет вид

$$\hat{H}' = \alpha L(L+1) + \beta G(G_2) + \gamma G(R_7) \quad (7)$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  – линейные комбинации интегралов, которые трактуются как варьируемые параметры,  $G(G_2)$  и  $G(R_7)$  – собственные значения операторов Казимира для групп  $G_2$  и  $R_7$ .

В таблице 1 приведены волновые функции для  $J=2$  иона  $\text{Pr}^{3+}$ , вычисленные из уравнения Шредингера (2). Поскольку абсолютная величина диагональных коэффициентов (выделены жирным шрифтом) больше, чем 0.9, то перемешивание состояний незначительное, и действие возбужденных конфигураций на каждый мультиплет будет строго индивидуально в зависимости от энергетического зазора. По этой причине в лазерных материалах, активированных ионами празеодима, влияние возбужденных конфигураций самое сильное на состояние  $^3P_2$ . Так как это состояние с самым большим значением энергии и самым маленьким энергетическим зазором. Теория Джадаа-Офельта не учитывает корректно влияние возбужденных конфигураций и для переходов на этот мультиплет дает значение, сильно отличающееся от экспериментального.

Таблица 1 – Волновые функции для  $J=2$  иона  $\text{Pr}^{3+}$ . Энергии в  $\text{см}^{-1}$ , в квадратных скобках обозначения состояний в кристалле.

J = 2			
ЭНЕРГИИ	4689.	15763.	21684.
	[3F ]	[1D ]	[3P ]
3F	<b>.9871</b>	.1576	.0286
1D	.1595	<b>-.9504</b>	-.2670
3P	-.0149	.2681	<b>-.9633</b>

Ситуация принципиально другая, например, для иона  $\text{Nd}^{3+}$ . В таблице 2 приведены волновые функции для  $J=3/2$  иона  $\text{Nd}^{3+}$ , вычисленные из уравнения Шредингера (2).

Таблица 2 – Волновые функции для  $J=3/2$  иона  $\text{Nd}^{3+}$ . Остальные обозначения такие же, как в таблице 1

J = 3/2						
ЭНЕРГИИ	10985.	12925.	20504.	25424.	27104.	32260.
	[4F ]	[4S ]	[2D1 ]	[2P ]	[4D ]	[2D2 ]
4F	.9693	.0766	-.1960	-.1265	-.0009	.0094
4S	-.0528	.9705	.1981	-.1248	.0216	-.0111
2D1	.2238	-.0410	<b>.6741</b>	<b>.6602</b>	.1268	.2048
2P	-.0600	.2245	<b>-.6548</b>	<b>.6990</b>	-.1381	.0980
4D	-.0127	.0157	-.1407	.0954	<b>.9056</b>	<b>-.3881</b>
2D2	-.0611	.0029	-.1393	-.1868	<b>.3799</b>	<b>.8931</b>

Жирным шрифтом выделены коэффициенты свидетельствующие, что состояние  $^2D_{13/2}$  сильно связано с состоянием  $^2P_{3/2}$ , аналогично  $^4D_{3/2}$  сильно связано с  $^2D_{3/2}$ . Степень смешивания состояний задается недиагональными коэффициентами. Для перечисленных

состояний такие коэффициенты превышают 0.38. Теперь возбужденные конфигурации будут производить одинаковое влияние одновременно на состояния  ${}^2D_{13/2}$  и  ${}^2P_{3/2}$ , аналогично на  ${}^4D_{3/2}$  и  ${}^2D_{23/2}$ . Это приводит к тому, что погрешность при описании по теории Джадда-Офельта будет теперь распределяться между парами переходов и явного свидетельства не применимости теории Джадда-Офельта не будет. Конфигурационное взаимодействие можно более корректно учесть, например, в модифицированной теории Джадда-Офельта [3].

Таким образом, анализируя на основе волновых функций электронную структуру состояний  $Ln^{3+}$  ионов в лазерных материалах, можно сделать вывод о степени смешивания спин-орбитальным взаимодействием состояний с одинаковым полным моментом  $J$  и прогнозировать степень влияния возбужденных конфигураций.

#### 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. 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.

УДК 697.9

## РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО УПРАВЛЕНИЯ ВЕНТИЛЯЦИИ ЗДАНИЯ

*Шалыт М.Д., студ., Мурычева В.В., ст. преп.*

*Витебский государственный технологический университет,*

*г. Витебск, Республика Беларусь*

Реферат. В статье рассмотрены основные принципы разработки АСУ приточно-вытяжной вентиляции. По мере осуществления механизации производится сокращение тяжелого физического труда, уменьшается численность рабочих, занятых непосредственно в производстве. Автоматизация исключает случаи травматизма. Перед рабочим персоналом ставятся другие задачи: анализ результатов управления технологическими процессами, составление заданий и программ для автоматических приборов, наладку сложных автоматических устройств и т.д.

Ключевые слова: вентиляция, автоматизация, управление, система, механизация, производство.

Вентиляция - это регулируемый воздухообмен в помещениях, создающий благоприятное для человека состояние воздушной среды (состава воздуха, температуры, влажности и пр.), а также совокупность технических средств, обеспечивающих такой воздухообмен.

В первую очередь, вентиляция должна обеспечивать правильный состав воздуха. Человек в процессе жизнедеятельности расходует кислород и выделяет углекислый газ. Здоровый воздух для дыхания должен содержать не менее 21 % кислорода, уменьшение же концентрации кислорода в воздухе может вызывать ощущение духоты, недомогание, головную боль. Постоянная нехватка кислорода снижает работоспособность, отрицательно сказывается на здоровье человека, ускоряет процесс старения.

Кроме того, в закрытом помещении обычно присутствуют источники загрязнения воздуха - строительные материалы, содержащие асбест, мебель из ДСП, бытовая химия, газовые плиты. Чтобы не допускать высокой концентрации вредных веществ в воздухе и существенного понижения содержания кислорода, воздух в жилом помещении должен полностью обновляться как минимум один раз в течение часа (кратность воздухообмена в час равна 1). В помещениях со специальными функциями кратность воздухообмена должна быть больше, например, в кухне кратность воздухообмена в час - не меньше трёх, в помещении, предназначенном для курения – 10.

Современные системы вентиляции не только обновляют воздух в помещении, они могут