

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2017

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 17–21 квітня 2017 року)



Суми
Сумський державний університет
2017

**Учет аномально сильного конфигурационного взаимодействия
при описании штарковской структуры мультиплетов
иона Pr^{3+} в $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$**

Фомичева Л.А.¹, доцент; Дунина Е.Б.², доцент;

Корниенко А.А.², профессор

¹ Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, г. Минск

² Витебский государственный технологический университет, г. Витебск

Выполнено описание штарковской структуры мультиплетов иона Pr^{3+} в $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ с помощью модифицированного гамильтониана кристаллического поля, полученного в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left\{ B_q^k + \left(\frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \right. \\ \left. + \sum_i \left(\frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k$$

Здесь E_J , $E_{J'}$ – энергия мультиплетов; G_q^k – параметры, обусловленные межконфигурационным взаимодействием, Δ – энергия возбуждённой конфигурации.

При нормальных условиях кристалл $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ имеет пространственную группу симметрии $C2/c$ ($a = 10.652\text{\AA}$, $b = 10.374\text{\AA}$, $c = 7.582\text{\AA}$). В $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ ион Pr^{3+} занимает позиции с локальной симметрией $C2$. Среди параметров кристаллического поля при точечной симметрии $C2$ имеются мнимые, что усложняет теоретические расчеты. Штарковскую структуру иона Pr^{3+} в этом случае можно успешно описать, используя симметрию $C2v$ или $D3h$. В данной работе вычисления проводились в рамках симметрии $C2v$.

Результаты расчетов показали, что с помощью модифицированного гамильтониана удастся улучшить описание штарковской структуры по сравнению с приближением слабого конфигурационного взаимодействия. Кроме того, на основе экспериментальных данных по штарковской структуре были получены параметры кристаллического поля нечетной симметрии и параметры ковалентности.