

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КОВАЛЕНТНОСТИ ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ $YAl_3(BO_3)_4$ : $Tb^{3+}$ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПО ШТАРКОВСКОЙ СТРУКТУРЕ

С учетом влияния возбужденных конфигураций противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  и конфигураций с переносом заряда выполнен анализ штарковской структуры мультиплетов иона  $Tb^{3+}$  в кристалле  $YAl_3(BO_3)_4$ . Из оптических спектров определены параметры ковалентности и параметры кристаллического поля нечетной симметрии.

**Ключевые слова:** лантаноиды, модифицированная теория кристаллического поля, оптическая спектроскопия, штарковская структура, гамильтониан, параметры ковалентности.

*The analysis of the Stark structure of  $Tb^{3+}$  multiplets in a  $YAl_3(BO_3)_4$  crystal was performed taking into account the influence of excited configurations with opposite parity and configurations with charge transfer. The covalence parameters and the parameters of the crystal field of odd symmetry were determined from the optical spectra.*

**Keywords:** Lanthanide ions, modified theory of crystal field, optical spectroscopy, Stark structure, Hamiltonian, covalence parameter.

На основе экспериментальных данных [1] для системы  $YAl_3(BO_3)_4 \cdot Tb^{3+}$  было выполнено теоретическое описание штарковских уровней в одноэлектронном приближении без учета влияния возбужденных конфигураций. Среднеквадратичное отклонение составило  $27,2 \text{ см}^{-1}$ .

Для улучшения описания был использован модифицированный гамильтониан кристаллического поля, полученный в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия [2; 3]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \left\{ B_q^k + \left( \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_J} + \frac{\Delta_d^2}{\Delta_d - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(d) + \right. \\ \left. + \sum_i \left( \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_J} + \frac{\Delta_{ci}^2}{\Delta_{ci} - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k(c) \right\} C_q^k. \quad (1)$$

Здесь  $\Delta_d$  и  $\Delta_{ci}$  – энергии возбужденной конфигурации противоположной четности типа  $4f^{N-1}5d$  и конфигурации с переносом заряда соответственно;  $\tilde{G}_q^k(d)$ ,  $\tilde{G}_q^k(c)$  – параметры, задающие величину вкладов соответствующих возбужденных конфигураций.

Величину вкладов возбужденной конфигурации противоположной четности  $4f^{N-1}5d$  в  $\tilde{G}_q^k$  можно оценить по формуле [4]:

$$\tilde{G}_q^k(d) = -\frac{2k+1}{2\langle f \| C^k \| f \rangle} \sum_{p', p''} \sum_{t', t''} (-1)^q \begin{pmatrix} p' & p'' & k \\ t' & t'' & -q \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} p' & p'' & k \\ f & f & d \end{pmatrix} \langle f \| C^{p'} \| d \rangle \langle d \| C^{p''} \| f \rangle \frac{B_{p'}^k(d)}{\Delta_d} \frac{B_{p''}^k(d)}{\Delta_d} \quad (2)$$

Величина вкладов в  $\tilde{G}_q^k$  от процессов с переносом заряда задается выражением [4]:

$$\tilde{G}_q^k(c) = \sum_b \tilde{J}^k(b) C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b). \quad (3)$$

Расчеты в приближении аномально сильного конфигурационного взаимодействия позволили уменьшить среднеквадратичное отклонение теоретических значений от экспериментальных до  $18,6 \text{ см}^{-1}$ , что на 32% лучше, чем в приближении слабого конфигурационного взаимодействия.

Кроме того, при описании штарковского расщепления с помощью модифицированной теории кристаллического поля были определены параметры ковалентности и параметры кристаллического поля нечетной симметрии, что существенно увеличивает объем информации об электронном строении примесных центров, которую можно получать из экспериментальных данных по оптической спектроскопии.

### Литература:

1. Ben Amar, N. Optical spectroscopy and crystalfield calculation of  $\text{Tb}^{3+}$  doped in  $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$  single crystal / N. Ben Amar, M.A. Hassairi, M. Dammak // J. Lumin. – 2016. – Vol. 173. – P. 223–230.
2. 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.
3. Корниенко, А.А. Определение параметров кристаллического поля нечетной симметрии из оптических спектров / А.А. Корниенко, Е.Б. Дунина, Л.А. Фомичева // Оптика и спектроскопия. – 2014. – Т. 116, № 5. – С. 739–746.

4. Корниенко, А.А. Теория спектров редкоземельных ионов в кристаллах: курс лекций / А.А. Корниенко. – Витебск : Издательство УО “ВГУ им. П.М. Машерова”, 2003. – 128 с.