

УДК 537.228.5

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ ИОНА Pr^{3+} В КРИСТАЛЛАХ La_2O_3 И Pr_2O_3 С ПОМОЩЬЮ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Студентка гр. ШТ-163 Ларионова Н.Н.,
кандидат физ.-мат. наук Фомичева Л.А.,
доктор физ.-мат. наук, профессор Корниенко А.А.
Витебский государственный технологический университет

При теоретическом прогнозировании оптических свойств лазерных материалов большое значение играет описание кристаллического поля. Обычно кристаллическое поле задают параметрами B_q^k , которые можно вычислить по какой-либо теоретической модели кристаллического поля. Например, модели точечных зарядов:

$$B_q^k = \langle r^k \rangle \sum_j \frac{-e^2 g_j}{R_j^{k+1}} (C_q^k(\Theta_j, \Phi_j))^* \quad (1)$$

или модели обменных зарядов:

$$B_q^k = \langle r^k \rangle \sum_j \rho_j (2\beta_j)^{k+1} \frac{-e^2 g_j}{R_j^{k+1}} (C_q^k(\Theta_j, \Phi_j))^* \quad (2)$$

Здесь e – заряд электрона; $\langle r^k \rangle$ – среднее значение, вычисленное на f -функциях; eg_j и (R_j, Θ_j, Φ_j) – заряд и сферические координаты j -иона соответственно.

Параметры β_j и ρ_j в модели обменных зарядов определяются

соотношениями $\beta_j = \frac{1}{1 + \rho_j}$ и $\rho_j = \rho_0 \left(\frac{R_0}{R_j} \right)^n$, где R_0 – наименьшее

расстояние R_j , $n = 3,5$ и $\rho_0 = 0,05$.

В данной работе выполнен расчет параметров кристаллического поля четной симметрии ($B_0^2, B_0^4, B_3^4, B_0^6, B_3^6$ и B_6^6) и нечетной симметрии ($B_0^1, B_0^3, B_3^3, B_0^5$ и B_3^5) с помощью модели точечных зарядов (1) и модели обменных зарядов (2) в кристаллах La_2O_3 и Pr_2O_3 .

Для выполнения расчетов также необходимы данные по структуре кристаллов. В кристаллах La_2O_3 и Pr_2O_3 ионы Pr^{3+} занимают позиции с локальной симметрией C_{3v} . При нормальных условиях La_2O_3 и Pr_2O_3 имеют пространственную группу симметрии $R\text{-}3m1$ ($a_0 = b_0 = 3,937 \text{ \AA}$, $c_0 = 6,129 \text{ \AA}$ для La_2O_3 и $a_0 = b_0 = 3,857 \text{ \AA}$, $c_0 = 6,916 \text{ \AA}$ для Pr_2O_3).