

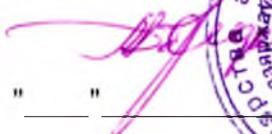
Министерство образования Республики Беларусь
ВИТЕБСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. П.М. МАШЕРОВА
(ВГУ)

УДК 548.0

№ госрегистрации 2000 3867

от 14.11.2000 г.

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор ВГУ
канд. биол. наук, профессор
А.М. Доробеев



14-21

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
**СОЗДАНИЕ АЛГОРИТМА ПРЕДСКАЗАНИЯ ИНТЕНСИВНОСТНЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ПОГЛОЩЕНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРНЫХ КРИ-
СТАЛЛОВ, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ ПРАЗЕОДИМА**
(заключительный)

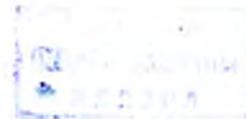
Декан физического факультета,
канд. пед. наук, доцент

 И. В. Галузо

Руководитель НИР,
д-р физ.-мат. наук, профессор

 А.А. Корниенко

Витебск 2001



РЕФЕРАТ

Отчет 35 с., 5 табл., 12 источников, 5 прил.

СОЗДАНИЕ АЛГОРИТМА ПРЕДСКАЗАНИЯ ИНТЕНСИВНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОГЛОЩЕНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ ПРАЗЕОДИМА

Объектом исследования являются лазерные кристаллы и стекла, активированные ионами празеодима.

Цель работы – разработка алгоритма определения параметров интенсивности по данным о структуре энергетического спектра.

В процессе работы проводились исследования по теории кристаллического поля и теории интенсивностей электрических дипольных переходов.

В результате выполнен сравнительный анализ применимости различных моделей кристаллического поля для иона Nd^{3+} в кристалле $PbWO_4$. Были рассмотрены гамильтонианы кристаллического поля в приближении слабого, промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия. Параметры кристаллического поля в приближении промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия зависят от энергии мультиплетов, в то время как в приближении слабого они являются константами. Это различие — принципиальное. Именно учет этого обстоятельства позволяет в приближении промежуточного конфигурационного взаимодействия достигнуть на 38 % лучшего описания энергетического спектра, чем в приближении слабого. Сделан вывод, что эффекты конфигурационного взаимодействия играют важную роль не только для кристаллов с примесью празеодима, как это считалось раньше, но и для кристаллов, содержащих неодим.

Впервые получены аналитические выражения для параметров межконфигурационного взаимодействия в приближении симметрии C_{2v} . На основе этих выражений разработано несколько методов определения параметров нечетного кристаллического поля для кристалла LaF_3 с примесью празеодима. Выполнен расчет параметров интенсивности с использованием определенных таким способом параметров нечетного кристаллического поля.

Сделан вывод, что более адекватный алгоритм определения параметров интенсивности должен учитывать ковалентный вклад в параметры межконфигурационного взаимодействия.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ.....	5
1. Эффективный гамильтониан кристаллического поля в различных приближениях.....	5
2. Сравнительный анализ применимости различных приближений для описания кристаллического расщепления $\text{PbWO}_4:\text{Nd}^{3+}$	7
3. Аналитические выражения для параметров межконфигурационного взаимодействия.....	10
4. Определение параметров нечетного кристаллического поля методом наименьших квадратов.....	21
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	24
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	26
Приложение 1. Процедура вычисления 3j-символов.....	27
Приложение 2. Процедура вычисления 6j-символов.....	28
Приложение 3. Программа вычисления параметров межконфигурационного взаимодействия G_q^k	29
Приложение 4. Явный вид функции среднеквадратичного отклонения	32
Приложение 5. Система нелинейных уравнений.....	33