УДК 539.184 : 548

ИНТЕНСИВНОСТИ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ВОЗБУЖДЕННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ИОНОВ ГРУППЫ ЖЕЛЕЗА В КРИСТАЛЛАХ

Веремейчик Т. Ф., Кустов Е. Ф., Макетов Т. К.

В схеме сильного поля развивается методика расчета сил осцилляторов переходов между возбужденными состояниями ионов с d^3-конфигурацией. Показано, что силы осцилляторов всех широкополосных переходов могут быть оценены с помощью экспериментальных данных по силам осцилляторов первых двух полос поглощения из основного состояния $^4A_2$. Необходимые расчеты выполнены методом подгрупповых коэффициентов и методом, разработанным в [2, 3, 8]. На основании полученных результатов по силам осцилляторов первых двух полос проведены оценки сил осцилляторов 19 переходов из состояний $^2E\ (t_2^3)$, $^2T_1\ (t_2^3)$, $^2T_2\ (t_2^3)$, $^4T_2\ (t_2^2e)$ иона Cr^{3+} в рубине, окиси магния, изумруде, танталате лития, алюминате иттрия. Корреляция вычисленных сил осцилляторов и имеющихся экспериментальных данных вполне удовлетворительна.

Расширяющееся применение кристаллов, активированных ионами группы железа и ионами хрома совместно с ионами редких земель, в качестве активных сред, генерирующих вынужденное излучение, обусловливает изучение характеристик поглощения из возбужденных состояний ионов группы железа, в частности ионов с d^3-конфигурацией. Относительные трудности измерения и обработки спектров возбужденных кристаллов и необходимость оценок наведенного поглощения, каналов утечки при поиске новых сред приводят к постановке задачи определения характеристик переходов между возбужденными состояниями иона по характеристикам хорошо известных переходов из основного состояния [1].

Целью работы является разработка именно такого подхода при расчете сил осцилляторов, наиболее актуальных с точки зрения вышеупомянутых применений широкополосных переходов $t_2^{n_1}e^{n_2} \rightarrow t^{n_1-1}e^{n_2+1}$ между возбужденными состояниями d^3-конфигурации. Определены силы осцилляторов переходов $^4A_2\,(t_2^3) \rightarrow {}^4T_2\,(t_2^2\,{}^3T_1e)$, $^4A_2\,(t_2^3) \rightarrow a\,{}^4T_1\,(t_2^2\,{}^3T_1e)$ и переходов $^2E\,(t_2^3)$, $^2T_1\,(t_2^3)$, $^2T_2\,(t_2^3) \rightarrow b\,{}^2T_2 \times (t_2^2\,{}^3T_1e)$, $c\,{}^2T_1\,(t_2^2\,{}^1T_2e)$, $b\,{}^2T_1\,(t_2^2\,{}^3T_1e)$, $c\,{}^2T_2\,(t_2^2\,{}^1T_2e)$, $^2A_1\,(t_2^2\,{}^1Ee)$, $b^2\ E\,(t_2^2\,{}^1Ee)$, $^2A_2\,(t_2^2\,{}^1Ee)$, $^4T_2\,(t_2^2\,{}^3T_1e) \rightarrow b\,{}^4T_1\,(t_2e^2\,{}^3A_2)$.

В работе использованы две методики. При расчетах на состояниях сильного поля интенсивностей электродипольных d—d-переходов, запрет с которых частично снят примешиванием конфигураций противоположной четности нечетной частью кристаллического поля или нечетными колебаниями $V_i^{\text{неч}}\,(\Gamma_{u_i}0)$ (Γ_{u_i} — компоненты кубических тензоров, сумма которых описывает нечетный потенциал $V_i^{\text{неч}}$), традиционной является методика, разработанная в [2, 3]. Эта методика позволяет для конкретных типов нечетных операторов $V_i^{\text{неч}}\,(\Gamma_{u_i}0)$ оценивать величины интенсивностей и их зависимости от поляризации. В настоящее время широко исследуются кристаллы с низкосимметричным окружением оптического центра (например, C_s, C_i, C_2). Трудности определения параметров теории, связанных с определенным типом Γ_{u_i}, в таких случаях позволяют предположить, что целесообразным является применение метода расчета интенсивностей с использованием коэффициентов подгруппы для редукции на группу O_h [4, 5]. При этом вводятся обобщенные параметры — комбинации параметров, связанных с определенным типом Γ_{u_i}, инвариантные относительно преобразований группы $U_{10} \supset U_4 \times U_6 \supset (SU_2 \times U_2)\ (SU_2 \times U_3) \supset O_h$. Таким образом, этот метод может быть применен к более широкому классу кристаллов.

Расчетные формулы

Обозначим через Γ' одноэлектронный оператор, под действием которого происходят электродипольные переходы. Γ' — комбинация дипольного момента $T_{1u}k''$ (k'' определяет поляризацию перехода) и $V_i^{\text{неч}}$ $(\Gamma_{u_i}0)$ — нечетных частей кристаллического поля или электронной части оператора колебаний. Для расчетов интенсивностей электродипольных вынужденных переходов в методе подгрупповых коэффициентов нужно провести классификацию оператора Γ' [6] с использованием редукции групп

$$U_{10} \supset U_4 \times U_6 \supset (SU_2 \times U_2)\,(SU_2 \times U_3) \supset SU_2 \times O_h. \tag{1}$$

Представления одноэлектронного оператора получаются при перемножении представлений группы U_{10}: $\{1\} \times \{1^9\} = \{1^{10}\} + \{21^8\}$. Первое слагаемое — это чисто скалярная величина и не может характеризовать оператор перехода. Для того чтобы получить представления векторного оператора, необходимо разложить представление $\{21^8\}$ по цепочке групп (1) и ограничиться представлениями со спином, равным нулю. Получено, что переходы между состояниями следующих конфигураций: t_2^n, e^n, $t_2^{n_1}e^{n_2}$, описываются соответственно операторами, приведенными в первой, второй и третьих строках табл. 1. Таким образом, при расчетах интенсивностей переходов типа $t_2^{n_1}e^{n_2} \rightarrow t_2^{n_1 \mp 1}e^{n_2 \pm 1}$ используются всего два оператора ${}^1T_{1g}$, ${}^1T_{2g}$ (четвертая строка).

Таблица 1

Наборы одноэлектронных операторов, вызывающих переходы между состояниями сильного кристаллического поля

№	U_{10}	$U_4 \times U_6$	$(SU_2 \times U_2)\,(SU_2 \times U_3)$	$SU_2 \times O_h$	Тип перехода $t_2^{n_1}S_1\Gamma_1e^{n_2}S_2\Gamma_2 : S\Gamma \rightarrow$ $\rightarrow t_2^{n_1'}S_1'\Gamma_1'e^{n_2'}S_2'\Gamma_2' : S\Gamma$
1	$\{21^8\}$	$\{0,\ 21^4\}$	${}^1\{0\}\ {}^1\{21\}$	${}^1E_g$, ${}^1T_{1g}$, ${}^1T_{2g}$	$n_i = n_i'$ $\quad S_1\Gamma_1 = S_1'\Gamma_1'$
2		$\{21^2,\ 0\}$	${}^1\{31\}\ {}^1\{0\}$	${}^1A_{2g}$, ${}^1E_g$	$n_i = n_i'$ $\quad S_2\Gamma_2 = S_2'\Gamma_2'$
3		$\{0,\ 0\}$	${}^1\{0\}\ {}^1\{0\}$	${}^1A_{1g}$	$n_i = n_i'$ $\quad S_i\Gamma_i' = S_i'\Gamma_i'$
4		$\{1,\ 1^5\}$	${}^2\{1\}\ {}^2\{1\}$	${}^1T_{1g}$, ${}^1T_{2g}$	$n_1' = n_1 \pm 1$ $\quad n_2' = n_2 \mp 1$
		$\{1^3,\ 1\}$			

В этом случае формулы для расчета сил осцилляторов f, полученные в [5] с использованием редукционной цепочки (1), упрощаются

$$f^{k''} = \chi_1 \nu \sum_{\mu,\bar{\mu}} \langle \alpha S\Gamma\Gamma_n\mu \,|\, \{k'k''\} \,|\, \bar{\alpha} S\bar{\Gamma}\bar{\Gamma}_n\bar{\mu} \rangle^2 =$$

$$= \frac{3}{4}\chi_1\nu\,[\Gamma] \left[\sum_{k'=T_1,\,T_2} [k']^{-1} (\bar{\Gamma}\bar{\Gamma}_n k'k'' \,|\, \Gamma\Gamma_n)\, P_{k'}^{k''} \begin{Bmatrix} k' & T_2 & E \\ \Gamma_2' & \bar{\Gamma} & \Gamma \end{Bmatrix} \right]^2 (ABCDEF)^2. \tag{2}$$

Здесь $(\Gamma\bar{\Gamma}_n k'k'' \,|\, \Gamma\Gamma_n)$ — коэффициент подгруппы для редукции группы октаэдра на подгруппу G и связи двух неприводимых представлений, Γ, Γ_n определяют представления в группах O_h и G, коэффициенты ABCDEF затабулированы в [7]. Набор тензоров k', k'' соответствует суммарному оператору Γ' и определяет параметры перехода в связи с редукцией O_h на G, $P_{k'}^{k''}$ — полуэмпирический параметр, [ ] — размерности представлений, ν — частота рассматриваемого перехода, в см^{-1}, $\chi_1 = n\,(n^2+2)^2/9n$, где n — показатель преломления.

Можно провести «кубическое» усреднение формулы (2), просуммировав по Γ_n и $\bar{\Gamma}_n$

$$f^{k''}=\chi_{1}\nu\,[\Gamma']\sum_{k'=T_1,\,T_2}\begin{bmatrix}k' & T_2 & E\\ \Gamma_2' & \Gamma' & \Gamma\end{bmatrix}\Omega_{k'}^{k''}(ABCDEF)^2=\chi_1\nu\sum_{k'=T_1,\,T_2}\Omega_{k'}^{k''}a_{k'}^{k''},\tag{3}$$

где $\Omega_{k'}^{k''}$ — полуэмпирические параметры, $a_{k'}^{k''}$ — численные коэффициенты, характеризующие конкретный переход. Эта формула может быть использована, когда в эксперименте компоненты низкосимметричного расщепления не разрешены.

Классификация состояний d^3-конфигурации по цепочке (1) проведена в [6].

В методе [2, 3, 8] набор тензоров $X_{\mu'}(\Gamma':\Gamma_{u_i})$, соответствующий суммарному оператору электродипольного перехода, записывается в виде

$$P_{k''}(T_{1u})\,V_i^{\text{печ}}(\Gamma_{u_i}0)=\sum_{\Gamma'\mu'}X_{\mu'}(\Gamma':\Gamma_{u_i})\langle T_{1u}k''\Gamma_{u_i}0\,|\,\Gamma'\mu'\rangle.\tag{4}$$

Суммирование в формуле (2. 1) [3] по компонентам μ, $\bar{\mu}$ исходного $\alpha S\Gamma$ и конечного $\bar{\alpha}\bar{S}\bar{\Gamma}$ состояний с учетом ортонормированности коэффициентов Клебша—Гордана позволило получить для определения силы осциллятора перехода между этими состояниями следующее выражение:

$$f^{k''}=\frac{A\nu}{[\Gamma_1]}\sum_{\Gamma'=T_1,\,T_2}S^{k''}=\frac{4}{\Delta W^2}\,\frac{A\nu}{[\Gamma_1]\,[\Gamma']}\sum_{\Gamma'=T_1,\,T_2}\Bigg(\sum_{\Gamma_{u_i}}\langle T_{1u}k''\Gamma_{u_i}0\,|\,\Gamma'\mu'\rangle\times$$

$$\times\langle\alpha S\Gamma\,\|\,X(\Gamma':\Gamma_{u_i})\,\|\,\bar{\alpha}\bar{S}\bar{\Gamma}\rangle\Bigg)^2=\frac{A'\nu}{3\,[\Gamma_1]}\sum_{\Gamma'=T_1,\,T_2}\left[\sum_{\Gamma_{u_i}}K(\Gamma')\,M(\Gamma',\,\Gamma,\,\bar{\Gamma})\right]^2.\tag{5}$$

Здесь $S^{k''}$ — сила линии, A, A' — множители, пропорциональные χ_1. Приведенный матричный элемент M вычисляется на многоэлектронных функциях и сводится к одноэлектронному элементу $\langle t_2\,\|\,x\,(\Gamma':\Gamma_{u_i})\,\|\,e\rangle$, согласно [8].

Таблица 2

Значения квадратов приведенных матричных элементов $M\,(\Gamma',\,\Gamma,\,\bar{\Gamma})$

Γ	Γ': T_1	Γ': T_2	
	$\Gamma={}^2E\,(t_2^3)$, ${}^4A_2\,(t_2^3)$		
$b\,{}^2T_2$, ${}^4T_2$	1	0	$\times\langle t_2\,\|\,x\,(\Gamma':\Gamma_{u_i})\,\|\,e\rangle$
$c\,{}^2T_2$	0	1	
$b\,{}^2T_1$, $a\,{}^4T_1$	0	1	
$c\,{}^2T_1$	1	0	
	$\Gamma={}^2T_1\,(t_2^3)$, ${}^2T_2\,(t_2^3)$		
$b\,{}^2T_2$	3	9	$\times\frac{1}{8}\langle t_2\,\|\,x\,(\Gamma':\Gamma_{u_i})\,\|\,e\rangle$
$c\,{}^2T_2$	3	1	
$b\,{}^2T_1$	9	3	
$c\,{}^2T_1$	1	3	
	$\Gamma={}^2T_1\,(t_2^3)$, $[{}^2T_2\,(t_2^3)]$		
${}^2A_1$	1 [0]	$0\left[\frac{1}{3}\right]$	$\times\frac{1}{2}\langle t_2\,\|\,x\,(\Gamma':\Gamma_{u_i})\,\|\,e\rangle$
${}^2A_2$	$0\left[\frac{1}{3}\right]$	1 [0]	
$b\,{}^2E$	$1\left[\frac{1}{3}\right]$	$1\left[\frac{1}{3}\right]$	

Примечание. $b\,{}^2\Gamma_i$, $c\,{}^2\Gamma_i$ соответственно обозначают состояния ${}^2\Gamma_i\,(t_2^2\,{}^3T_1e)$, ${}^2\Gamma_i\,(t_2^2\,{}^1T_2e)$, ${}^2A_1$, ${}^2A_2$, $b\,{}^2E$ — состояния ${}^2\Gamma\,(t_2^2\,{}^1Ke)$.

Величины M, вычисленные с nj-символами и генеалогическими коэффициентами [9–11], приведены в табл. 2. Очевидно, что их значения для рассматриваемых переходов отличны от нуля при Γ', равных T_{1g}, T_{2g}, что находится в соответствии с данными табл. 1. Таким образом, значение f в соответствии с (5) определяется суммой квадратов сомножителей, один из которых K зависит от Γ_{u_i} и определяет соотношение между значениями f в разных поляризациях, оставаясь постоянной величиной для всех переходов, а второй сомножитель M определяется состояниями, участвующими в переходе.

Отметим, что формула (2. 1) [3] получена с определенными предположениями в отличие от (2) относительно энергий ΔW примешиваемых состояний противоположной четности. В (2) таких предположений не вводится, и параметризация осуществляется на основе симметрии Γ и $\bar{\Gamma}$ по редукции $U_{10} \supset \ldots \supset O_h$.

Параметризация интенсивностей переходов

Из (3), (5) следует, что для определения интенсивностей всех широкополосных переходов необходимо в кубических кристаллических полях два параметра теории. При наличии искажения имеется несколько наборов $T_{1u}k''$, так что число параметров определяется редукцией T_{1u} на конечную подгруппу G: в группах аксиальной симметрии таких параметров будет четыре и в более низких группах — шесть. Согласно (3), (5), интенсивности переходов параметризуются через сумму квадратов слагаемых, часть из которых определяется оператором перехода T_{1g}, а вторая часть — оператором T_{2g}.

Оценка по этой методике сил осцилляторов переходов рассматриваемого типа обеспечивается тем, что параметры, задаваемые операторами T_{1g} и T_{2g}, могут быть определены раздельно. Симметрия задачи для d^3-конфигурации в сильном кристаллическом поле приводит к тому, что параметры, задаваемые оператором T_{1g}, определяются по экспериментальным значениям f переходов $^4A_2 \to {}^4T_2$, а параметры, задаваемые оператором T_{2g}, — по экспериментальным значениям f переходов $^4A_2 \to a^4T_1$ спектров поглощения из основного состояния в разных поляризациях.

Таблица 3

Значения параметров $a_{k'}^{k''}$ для переходов между уровнями d^3-конфигурации

$\Gamma(t_2^3)$	$\Gamma(t_2^2e)$	$a_{T_1}^{k''}$	$a_{T_2}^{k''}$	$\Gamma(t_2^3)$	$\Gamma(t_2^2e)$	$a_{T_1}^{k''}$	$a_{T_2}^{k''}$
	$b\,^2T_2$	$\frac{2}{9}$			$^2A_1$	$\frac{2}{27}$	
^2E	$c\,^2T_1$	$\frac{2}{9}$		$^2T_1$	$b\,^2E$	$\frac{2}{27}$	$\frac{2}{27}$
	$b\,^2T_1$		$\frac{2}{9}$		$^2A_2$		$\frac{2}{27}$
	$c\,^2T_2$		$\frac{2}{9}$		$^2A_1$		$\frac{2}{81}$
	$b\,^2T_2$	$\frac{1}{18}$	$\frac{3}{18}$	$^2T_2$	$b\,^2E$	$\frac{2}{81}$	$\frac{2}{81}$
$^2T_1$, $^2T_2$	$c\,^2T_1$	$\frac{1}{54}$	$\frac{1}{18}$		$^2A_2$	$\frac{2}{81}$	
	$b\,^2T_1$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{18}$	$^4A_2$	$^4T_2$	$\frac{4}{9}$	
	$c\,^3T_2$	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{54}$		$a\,^4T_1$		$\frac{4}{9}$
				$^4T_2\,(t_2^2e)$	$b\,^4T_1\,(t_2e^2)$	$\frac{2}{9}$	$\frac{2}{27}$

Таблица 4

Экспериментальные и вычисленные по полосам поглощения из основного состояния иона Cr^{3+} значения сил осцилляторов переходов ($\times 10^4$) между возбужденными состояниями иона в кристаллах

Состояния			Рубин		Изумруд		Окись магния		Алюминат иттрия	
Г	Г		эксперимент [14]	вычисление	эксперимент [14]	вычисление	эксперимент [14]	вычисление	эксперимент [16]	вычисление
$^4A_2$	$^4T_2$	σ	2.6	2.6	0.6	0.6	0.3	0.3	0.4	0.4
		π	0.8	0.8	1.0	1.0				
	a^4T_1	σ	4.0	4.0	0.8	0.8	1.7	1.7	1.4	1.4
		π	6.0	6.0	0.7	0.7				
^2E	b^2T_2 c^2T_1	σ	1.2	2.2	0.5	0.6	0.2	0.3		0.
		π	0.8	0.8	0.9	1.1				
	b^2T_1	σ	1.4	1.9	0.4	0.4	1.0	1.1		1.3
		π	2.1	2.7	0.3	0.3				
	c^2T_2	σ	2.1	2.1	0.6	0.5	0.9	1.3		1.4
		π	2.8	3.2	0.4	0.4				

Примечание. Для танталата лития $f^{\sigma}_{\text{эксп}}(^4A_2 \to {}^4T_2) = 3.8 \cdot 10^{-4}$, $f^{\pi}_{\text{эксп}} = 1.2 \cdot 10^{-4}$ [15], данные по $f^{\sigma,\pi}_{\text{эксп}}(^4A_2 \to a\,^4T_1)$ отсутствуют. Согласно табл. 3, в этом случае могут быть определены значения $f^{\sigma,\pi}$ только для нескольких переходов. Так, $f^{\sigma}_{\text{выч}}(^2E \to b\,^2T_2,\ c\,^2T_1) = 3.8 \cdot 10^{-4}$, $f^{\pi}_{\text{выч}}(^2E \to b\,^2T_2,\ c\,^2T_1) = 1.2 \times \times 10^{-4}$.

В табл. 3 приведены в терминах параметров $a^{k''}_{T_1}$, $a^{k''}_{T_2}$, вычисленных по (3), (5), результаты, необходимые для расчетов значений $f^{k''}$. В табл. 4, 5 приведены результаты вычислений по описанным методикам сил осцилляторов 19 переходов между возбужденными состояниями ионов Cr^{3+} в кристаллах рубина, изумруда, окиси магния, алюминате иттрия. Во всех кристаллах, кроме окиси магния, локальное окружение иона характеризуется тригональной симметрией.

Проведем расчет значений f для группы C_3. $V_i^{\text{неч}}$ является суммой тензоров A_{2u}, $T_{1u}\,(a_0)$, $T_{2u}\,(x_0)$ (обозначения [3]). Значения $S_1^{k''}$, $S_2^{k''}$ соответственно для переходов $^4A_2 \to {}^4T_2$ и $^4A_2 \to a^4T_1$, определенные по (5) с помощью генеалогических коэффициентов, вычисленных в тригональном базисе в [12], равны

$$\left.\begin{aligned} S_1^{\sigma} &= \frac{2}{9}\,[3D\,(T_{1u})^2 + D\,(T_{2u})^2], \\ S_1^{\pi} &= \frac{8}{9}\,D^2\,(T_{2u}), \\ S_2^{\sigma} &= \frac{2}{9}\,\{[C\,(T_{1u}) + \sqrt{6}\,C\,(A_{2u})]^2 + 3C\,(T_{2u})^2\}, \\ S_2^{\pi} &= \frac{8}{9}\left[C\,(T_{1u}) - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\,C\,(A_{2u})\right]^2. \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

Здесь $D(\Gamma_{u_i}) = \frac{A'}{3} \times \langle t_2 \| x\,(T_{1g} : \Gamma_{u_i}) \| e \rangle$, $C = \frac{A'}{3} \langle t_2 \| x\,(T_{2g} : \Gamma_{u_i}) \| e \rangle$. Расчеты показали, что

$$\left.\begin{aligned} S_{1'}^{\sigma,\pi} = S_{1'}^{\sigma,\pi} = S_{1''}^{\sigma,\pi}, \\ S_{2'}^{\sigma,\pi} = S_{2'}^{\sigma,\pi} = S_{3}^{\sigma,\pi}, \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

где $S_{1'}^{k''}, S_{1''}^{k''}$ — соответственно силы линий $^2E\,(t_2^3) \to b\,^2T_2\,(t_2^2\,{}^3T_1 e)$, $^2E\,(t_2^3) \to c\,^2T_1 \times \times (t_2^2\,{}^1T_2 e)$; $S_{2'}^{k''}$, $S_3^{k''}$ — соответственно силы линий $^2E\,(t_2^3) \to b^2T_1\,(t_2^2\,{}^3T_1 e)$, $^2E\,(t_2^3) \to \to c^2T_2\,(t_2^2\,{}^1T_2 e)$. В эти значения $S_i^{k''}$ входят M, равные единичным значениям $D\,(\Gamma_{u_i})$, $C\,(\Gamma_{u_i})$, поэтому для остальных переходов табл. 4, 5 $S_i^{\sigma,\pi}$ равны

$$S_i^{\sigma,\pi} = S_1^{\sigma,\pi} M^2\,(T_1,\ \Gamma\bar{\Gamma}) + S_2^{\sigma,\pi} M^2\,(T_2,\ \Gamma,\ \bar{\Gamma}). \qquad (8)$$

Таблица 5

Вычисленные по полосам поглощения из основного состояния иона Cr^{3+} значения сил осцилляторов переходов ($\times 10^4$) между возбужденными состояниями иона в кристаллах

$\Gamma(t_2^3)$	$\Gamma(t_2^2e)$		Рубин	Изумруд	Окись магния	Алюминат иттрия
$^2T_1$	b^2T_2	σ	1.4	0.3	0.6	0.1
		π	1.7	0.3		
	c^2T_1	σ	0.5	0.9	0.2	0
		π	0.6	1.0		
	b^2T_1	σ	1.6	0.4	0.4	0.2
		π	1.0	0.6		
	c^2T_2	σ	0.7	0.2	0.2	0.1
		π	0.9	0.2		
	$^2A_1$	σ	0.4	0.1	0	0.1
		π	0.1	0.1		
	^2E	σ	1.0	0.2	0.4	0.1
		π	0.9	0.2		
	$^2A_2$	σ	0.6	0.2	0.5	0.5
		π	0.8	0.1		
$^2T_2$	b^2T_2	σ	0.9	0.2	0.4	0.1
		π	1.1	0.2		
	c^2T_1	σ	0.3	0.6	0.1	0
		π	0.4	0.6		
	b^2T_1	σ	0.9	0.3	0.3	0.2
		π	0.7	0.4		
	c^2T_2	σ	0.5	0.1	0.1	0.1
		π	0.3	0.2		
	$^2A_1$	σ	0.7	0	0.1	0
		π	0.1	0		
	b^2E	σ	0.2	0.1	0.1	0
		π	0.2	0.1		
	$^2A_2$	σ	0.2	0	0	0.3
		π	0.1	0.1		
$^4T_2(t_2^2e)$	$b^4T_1(t_2e^2)$	σ	2.1	0.5	0.5	0.3
		π	1.3	0.7		

Выводы

Как следует из табл. 4, корреляция вычисленных значений с имеющимися экспериментальными данными вполне удовлетворительна. Однако, как правило, экспериментальные значения $f^{k''}$ для переходов $^2E \rightarrow {}^2\Gamma(t_2^2e)$ меньше ожидаемых по теоретическим оценкам. Это обстоятельство может быть обусловлено существенным перемешиванием в системе спин-дублетных уровней состояний сильного поля кулоновским взаимодействием, недостаточно обоснованным вычитанием фона — края полосы переноса заряда, особенностями взаимодействия колебаний решетки с высокоэнергетическими состояниями иона и другими причинами [13].

Приведенный пример для симметрии C_3, по-видимому, позволяет сделать вывод, что в случае низкосимметричных оптических центров, для которых $V_i^{\text{неч}}$ является суммой достаточно большого числа кубических тензоров, использование инвариантных относительно группы вращений комбинаций параметров интенсивностей обладает преимуществами. Однако для случаев достаточно высокой симметрии оптического центра или преимущественного влияния одного члена формула (5) дает возможность определения качественных соотношений между значениями f в разных поляризациях без привлечения экспериментальных данных, а также возможности использования меньшего числа полуэмпирических параметров и решения обратной задачи — определения по поляризационным экспериментам типа колебания или статической составляющей поля, индуцирующих переход. Последнее обстоятельство представляется важным с точки зрения выявления особенностей взаимодействия переходов между возбужденными состояниями иона с колебаниями решетки.

Статическая и динамическая индукции электродипольных переходов в использованных методиках учтена в системе одних параметров. Однако вклад того или иного механизма может быть проведен по анализу температурной зависимости этих параметров как для переходов из основного, так и для переходов из возбужденного состояний.

Таким образом, полученные результаты показывают возможность оценки только по спектру поглощения из основного состояния сил осцилляторов переходов между возбужденными состояниями ионов d^3-конфигурации. Эти результаты вместе с результатами [1] позволяют получать детальную оценку наведенного поглощения и каналов утечки, возникающих при накачке кристалла. Численные данные табл. 3—5 показывают, что переходы из состояний $^4A_2, {}^4T_2, {}^2E$ являются наиболее интенсивными, так что даже в случае достаточной заселенности состояния $^2T_1\,(t_2^3)$ основными каналами утечки можно считать широкополосные переходы из состояний ^2E, $^4T_2$.

Литература

[1] Veremeichik T. F. — Phys. St. Sol. (b), 1984, v. 124, N 2, p. 719.
[2] Sugano S., Tanabe Y. — J. Phys. Soc. Japan, 1958, v. 13, N 8, p. 880.
[3] Shinada M., Sugano S., Kushida T. — J. Phys. Soc. Japan, 1966, v. 21, N 7, p. 1342.
[4] Кустов Е. Ф. — Кристаллография, 1974, т. 19, № 4, с. 701.
[5] Кустов Е. Ф., Баранов М. Н. — Опт. и спектр., 1976, т. 40, в. 3, с. 510.
[6] Kustov E. F. — Phys. St. Sol. (b), 1977, v. 81, N 2, p. 421.
[7] Кустов Е. Ф., Волков В. М., Петров В. П., Баранов М. Н. — В кн.: Коэффициенты подгруппы точечных групп кристаллов. М., 1982.
[8] Tanabe Y., Kamimura H. — J. Phys. Soc. Japan, 1958, v. 13, N 2, p. 394,
[9] Мауза Э. В., Батарунас И. В. — Тр. АН ЛитССР. Сер. Б, Химия, техника, физ. география, 1961, т. 26, с. 27.
[10] Griffith J. S. — Mol. Phys., 1956, v. 28, N 18, p. 358.
[11] Tanabe Y., Sugano S. — J. Phys. Soc. Japan, 1954, v. 9, N 5, p. 753.
[12] Веремейчик Т. Ф. — Автореф. канд. дис. М., 1977.
[13] Веремейчик Т. Ф., Калинкина И. Н. — В кн.: Тезисы VIII Всесоюз. симпоз. по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов. Свердловск, 1985, с. 40.
[14] Fairbank W. M., Klauminzer G. K., Schawlow A. L. — Phys. Rev. B, 1975, v. 117, N 1, p. 60.
[15] Glass A. M. — J. Chem. Phys., 1969, v. 50, N 4, p. 1501.
[16] Weber M. J., Varitimos T. E. — J. Appl. Phys., 1974, v. 45, N 2, p. 810.

Поступило в Редакцию 22 мая 1986 г.