

# YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 斯塔克子能级的计算

宋增福 连绍仁 顾英俊 李大芬

(北京大学物理系、固体物理所)

YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 是性能良好的固体激光材料, 对它进行研究是有意义的。

YAlO<sub>3</sub> 晶体具有钙钛矿型结构, 属正交晶系, 空间群为 D<sub>2h</sub><sup>16</sup>-P<sub>nma</sub>。当三价稀土离子 (Re<sup>3+</sup>) 掺入 YAlO<sub>3</sub> 晶体后, Re<sup>3+</sup> 取代 Y<sup>3+</sup> 离子, 其格位对称性为 C<sub>s</sub>。由于 Nd<sup>3+</sup> 有奇数个电子, 因此在晶体场的作用下, Nd<sup>3+</sup> 的斯塔克(Stark)子能级只存在 Kramers 双重简并。

M. J. Weber 等曾较为详细地测量了 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 的室温(300K)吸收谱, 对子能级作了初步标定, 并对 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 在激光方面的应用进行了一定的研究。A. A. Kaminskii 也给出了 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 在 77 K 时的子能级能量值。由于 Nd<sup>3+</sup> 的某些高能级间隔不是足够大, 所以 Nd<sup>3+</sup> 在 YAlO<sub>3</sub> 晶场作用下产生的斯塔克子能级出现交迭, 要对实验中得到的这些谱线群进行标定是比较困难的, 可靠性不大。K. K. DEB 和 N. Karayianis 等只对 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 的基光谱项(<sup>4</sup>I)进行了拟合计算。宋增福等曾从 0.33~5.7 μm 的波段范围内系统地测定了温度为 10 K、90 K 和 300 K 时 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 的吸收光谱, 也进行了子能级分类。但以上都没有对 YAlO<sub>3</sub>:Nd<sup>3+</sup> 的斯塔克子能级作出全面和准确的标定, 为此我们根据 Racah-Judd 的不可约张量方法, 用包括静电库仑相互作用、自旋-轨道相互作用和组态相互作用的自由离子哈密顿算符, 再加上晶场相互作用哈密顿算符作为微扰, 首次对我们测量的 90 K 时的子能级实验结果进行了包括高能级在内的拟合计算, 得到了使均方差最小的自由离子拟合参数和晶场拟合参数。Nd<sup>3+</sup> 的能级是按 {LS} 耦合分类的, 我们根据计算结果, 首次对 Nd<sup>3+</sup> 在 YAlO<sub>3</sub> 晶场作用下的斯塔克子能级进行了比较全面和准确的归属, 并以 <sup>2s+1</sup>L<sub>J(μ)</sub> 来标记。由于 Nd<sup>3+</sup> 在 YAlO<sub>3</sub> 晶体中对称性很低, 所以计算量很大, 拟合 Nd<sup>3+</sup> 在低对称晶场作用下的全部斯塔克子能级, 这还是初次尝试, 对今后研究稀土离子在各种晶体中的性质是有益的。