

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛЕИНАТА ПРАЗЕОДИМА

Орлин Н.А.

Владимирский государственный университет

Данная работа посвящена исследованию спектров поглощения малеината празеодима в растворах и кристаллическом состоянии. Малейнат празеодима получен взаимодействием оксида празеодима с малеиновой кислотой. После соответствующей обработки выделены монокристаллы $\text{Pr}_2(\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4)_3 \cdot n \text{H}_2\text{O}$.

Характерной особенностью редкоземельных элементов является наличие 4f – квантового подуровня. У иона Pr^{3+} на f – подуровне содержится два электрона. Оптические характеристики соединений празеодима обусловлены электронными переходами в пределах именно этого подуровня.

Спектры поглощения изучались в интервале 4000-9000 Å. Предварительные исследования показали, что полученные кристаллы малейната празеодима относятся к пространственной группе C_2 . в спектрах поглощения обнаруживается пять групп линий, относящихся к электронным переходам, с основного термина иона празеодима $^3\text{H}_4$ на пять возбужденных термов: $^1\text{D}_2$, $^3\text{P}_0$, $^3\text{P}_1$, $^1\text{I}_6$ и $^3\text{P}_2$. Все возбужденные термы расщепляются на $2u+1$ компонент. Для основного $^3\text{H}_4$ термина экспериментально получено только три компонента.

Изучая спектр слабого раствора малейната празеодима и сравнивая его с теоретическими предпосылками, удалось определить центры тяжести SLY – уровней акваиона Pr^{3+} . Они были приняты за центры тяжести соответствующих термов так называемого «свободного иона» Pr^{3+} . Сравнивая центры тяжести термов монокристаллов $\text{Pr}_2(\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4)_3 \cdot n \text{H}_2\text{O}$ с центрами тяжести аналогичных термов «свободного иона» Pr^{3+} , выяснена степень влияния малейнатного окружения на центральный ион Pr^{3+} в монокристаллах. Используя значения компонент основного $^3\text{H}_4$ термина определены центры тяжести энергетических уровней иона Pr^{3+} в матрице данного кристалла. Их значения следующие: терм $^1\text{D}_2$ располагается в области частот 16720 см^{-1} , терм $^3\text{P}_0$ – 20600 см^{-1} , терм $^3\text{P}_1$ – 21140 см^{-1} , терм $^1\text{I}_6$ – 21270 см^{-1} , терм $^3\text{P}_2$ – 22360 см^{-1} .

Для характеристики природы взаимодействия иона Pr^{3+} с ближайшим малейнатным окружением рассчитали параметры электростатического (F_2, F_4, F_6) и спин-орбитального взаимодействия (ϵ).

Для исследованных образцов $\text{Pr}_2(\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4)_3$ такие параметры имеют следующие значения: $F_2=312 \text{ см}^{-1}$, $F_4= 51 \text{ см}^{-1}$, $F_6= 5 \text{ см}^{-1}$, $\epsilon=764 \text{ см}^{-1}$. Эти результаты использованы для определения центров тяжести SLY– уровней иона Pr^{3+} , находящегося в матричном окружении групп $\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4^{2-}$. Они практически совпадают со значениями, полученными непосредственно из спектров. С другой стороны, проведено сравнение параметров F_2, F_4, F_6 и ϵ исследуемых образцов с их расчетными значениями для «свободного иона» Pr^{3+} . Имеются лишь незначительные отклонения. Отсюда можно сделать вывод, что вклад ковалентной связи во взаимодействие иона Pr^{3+} с малейнатным окружением, обусловленный 4f – электронами, незначителен.