

Nd³⁺:Gd₃Sc₂Al₃O₁₂晶场能级及拟合*

肖 进¹⁾³⁾ 张庆礼^{1)†} 周文龙¹⁾ 谭晓靓¹⁾ 刘文鹏¹⁾ 殷绍唐¹⁾ 江海河¹⁾²⁾ 夏上达³⁾ 郭常新³⁾

1)(中国科学院安徽光学精密机械研究所安徽省光子器件与材料实验室,合肥 230031)

2)(中国科学院合肥物质科学研究院,合肥 230031)

3)(中国科学技术大学物理系,合肥 230026)

(2009 年 10 月 26 日收到;2010 年 1 月 28 日收到修改稿)

Nd³⁺:GSAG 是性能优良的 942 nm 激光晶体.用提拉法成功生长 Nd³⁺:GSAG 单晶,研究其室温透射光谱,辨认位置高达 29967 cm⁻¹ 的 68 个 Nd³⁺ 晶场能级.对这些能级拟合了自由离子及晶场 Hamilton 参量,拟合标准偏差为 16.7 cm⁻¹,表明实验与计算能级符合很好.获得的 Hamilton 参量可用于计算 Nd³⁺:GSAG 中 Nd³⁺ 的波函数、预测晶场分裂以及研究发光特性等.

关键词: 晶体场, 能级分裂, 透射光谱, 晶体生长

PACC: 7170C, 7170, 8110

1. 引 言

水蒸汽是大气中最重要温室气体,它在温室效应、大气对流、云雾雨雪等重要气象过程中起关键作用.但同时水蒸汽也是目前了解得最少的大气成分.目前,在气象气候的变化及预测研究领域,仍不能准确模拟水循环的重要原因就是很难获取整个大气对流层的高精度、高垂直分辨率的水蒸汽廓线,这被认为是大气科学中的主要挑战^[1].机载差分吸收雷达将有望解决这一困难.考虑到水蒸汽测量的需要和技术上的可行性,水蒸汽在 940 nm 附近的 935,942 和 944 nm 三个波段的强吸收谱线可用于高精度的差分激光雷达吸收测量^[2,3].

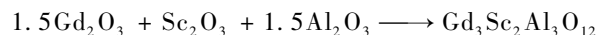
掺杂 Nd³⁺ 离子的晶体是一类应用非常广泛的激光材料^[4-6],Nd³⁺ 离子掺杂的石榴石晶体 Gd₃Sc₂Ga₃O₁₂ (简称 Nd³⁺:GSAG) 在 942 nm 处有发射,且具有很高的荧光分支比^[7],此发射来自于 Nd³⁺ 离子的 ⁴F_{3/2} → ⁴I_{9/2} 跃迁,此波长正处于水蒸汽的强吸收区,是探测大气对流层顶部和平流层的弱水蒸汽分布的理想波长.此外 Nd³⁺:GSAG 激光晶体的抗辐射性能较强,晶体的生长也并不存在组分的挥发,因而制备高质量的晶体相对容易,因此 Nd³⁺:GSAG 晶体作为水蒸汽探测的激光晶体近年来受到

了重视.

目前,仅报道过 Nd³⁺:GSAG 晶体位置较低的 ⁴I_{9/2}, ⁴I_{11/2}, ⁴I_{13/2}, ⁴I_{15/2}, ⁴F_{3/2} 几个能级多重态的晶场分裂^[8],更高能级晶场分裂的详细情况未见报道,使得对 Nd³⁺:GSAG 的光谱分析还不是非常全面,也未见对其晶体场参量进行拟合的报道.本文测量了 Nd³⁺:GSAG 的透射光谱,确定了宽波长范围内 Nd³⁺:GSAG 的能级,对其晶场能级进行了拟合,给出了晶场参数,以用于 Nd³⁺:GSAG 的发光特性的进一步研究.

2. 实 验

按照 GSAG 化学计量比称取纯度为 99.995% 的 Gd₂O₃, Sc₂O₃ 和 Al₂O₃,充分混合后,将混合物压制成盘片并在空气中以 1000 °C 的温度煅烧 24 h,以进行如下的固相反应:



将 15 g 的 Nd₂O₃ 和煅烧后的 1800 g GSAG 的多晶粉料放入铱坩埚用来生长 Nd³⁺:GSAG 晶体,晶体生长设备采用配有自动控制设备的 SJ78-3 晶体炉,自动控制软件采用 CZControl 1.0.图 1 为用提拉法沿〈111〉方向生长出的 Nd³⁺:GSAG 晶体.晶体呈紫红色,无开裂现象.将生长后的 Nd³⁺:GSAG 晶体

* 国家自然科学基金(批准号:50772112, 50872135, 90922003)和安徽省优秀青年基金(批准号:08040106820)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zql@aiofm.ac.cn

在空气中恒温 72 h 进行退火,然后在垂直于 $\langle 111 \rangle$ 方向切割出薄片,双面抛光成厚度为 2.9 mm 的样品,用于透射光谱的测试.透射光谱采用 Perkin

Elmer 公司的 Lambda 900 在室温下测量,测量波长步进间隔为 0.1 nm.



图 1 提拉法生长的 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 晶体

3. 结果与讨论

3.1. 室温下 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 透射光谱的能级指认

晶体中的稀土离子因受到周围其他离子的作用使得以 $^{2S+1}L_J$ 标志的能级进一步分裂成若干个 Stark 子能级,分裂的 Stark 子能级可以用点群的不可约表示进行标记^[9].在 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 晶体中, Nd^{3+} 离子取代的是位置点群为 D_2 的 Gd^{3+} 离子,由于 Nd^{3+} 离子包含 3 个 4f 电子,是奇数电子系统,晶场 Hamilton 具有时间反演不变性,故而将会导致能级的 Kramers 简并,即所有的 Stark 子能级都是二重简并的^[10]. Nd^{3+} 离子的能级 $^{2S+1}L_J$ 在 D_2 的晶场中将分裂为 $(2J+1)/2$ 个 Stark 子能级,均属 D_2^* 群的 Γ_5 表示. D_2 对称性下 Nd^{3+} 离子的所有 Stark 能级之间都可以发生电偶极跃迁及磁偶极跃迁. Nd^{3+} 离子的基态能级是 $^4I_{9/2}$,在 GSAG 晶场中分裂成 5 个 Stark 能级,每个 Stark 能级上的粒子数均满足 Boltzmann 分布.在低温下,粒子数可认为基本上位于基态的最低能级上.然而在室温下,基态多重态的较高 Stark 能级也有一定的粒子数分布,因此在室温下的透射光谱中,吸收峰并不总是来自于基态的最低 Stark 子能级的跃迁,来自于基态较高 Stark 能级的吸收跃迁也会被观察到.

文献[8]中给出了 77 K 时 GSAG 晶体中 Nd^{3+} 离子的 $^{2S+1}L_J$ 多重态在晶场中的能级分裂后的晶场

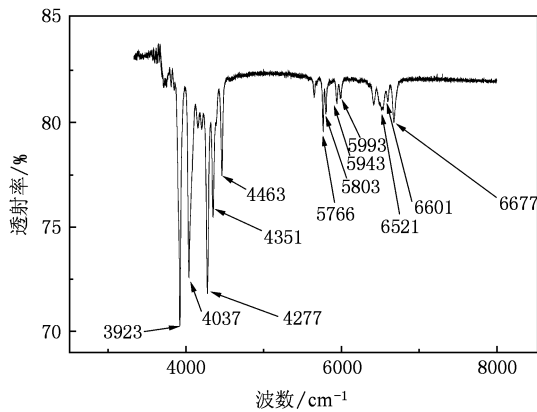
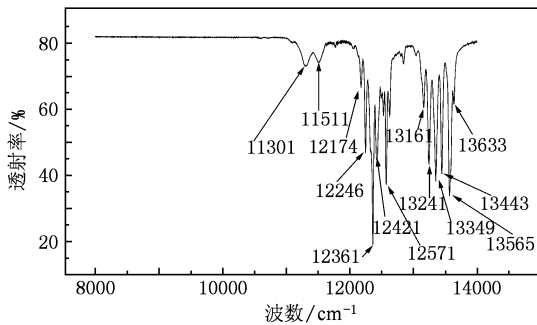
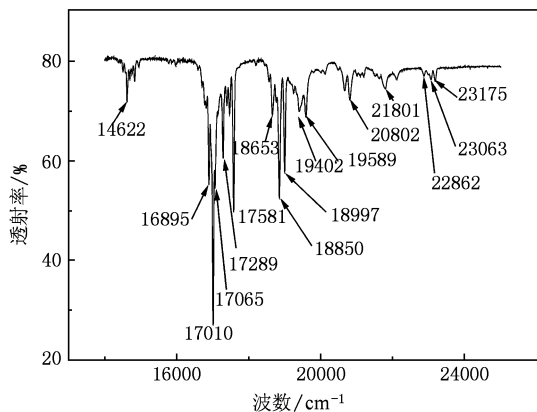
能级位置,但其报导的能级只包含了 $^4I_{9/2}$, $^4I_{11/2}$, $^4I_{13/2}$, $^4I_{15/2}$, $^4F_{3/2}$ 几个能级多重态(具体的 Stark 能级的位置见表 1).按照表 1 中 Stark 能级数据,通过 Boltzmann 分布公式可计算室温下基态各 Stark 能级占基态总粒子数的百分比,结果为:0,116,193,316 和 808 cm^{-1} 能级上的粒子占据比例分别为 45%,26%,18%,10% 和 1%.可见室温下大多数的粒子还是分布在基态的最低 Stark 子能级 0 cm^{-1} 上.由于温度对于 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 中的各个 Stark 能级的位置并无明显的影响,只对基态晶场能级上的粒子数分布影响较大,因此通过对室温下的透射光谱进行分析,可以确定部分晶场能级的位置.

表 1 在 77 K 时 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 中的晶场能级分裂^[8]

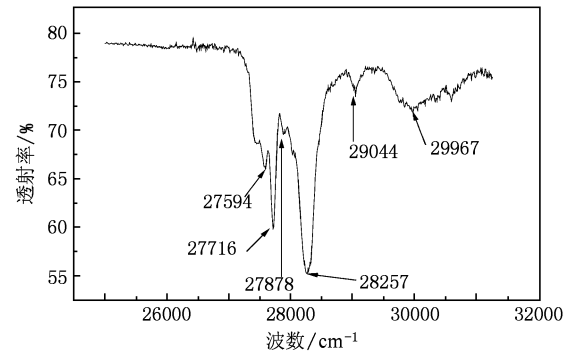
$^{2S+1}L_J$	Stark 能级/ cm^{-1}
$^4I_{9/2}$	0,116,193,316,808
$^4I_{11/2}$	1979,2023,2114,2144,2422,2492
$^4I_{13/2}$	3904,3927,4048,4061,4402,4477
$^4I_{15/2}$	5767,5800,5942,5992,6521,6545,6601,6682,
$^4F_{3/2}$	11421,11537

图 2—5 是 (0.6 at%) $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 晶体在室温下测得的透射光谱.各图中横坐标均用波数表示,覆盖的范围是 3000—31250 cm^{-1} ,纵坐标均为透射光谱的透过率.

以表 1 中的数据为参考,结合实验测得的室温下的透射光谱图 2—5 对 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 的能级进行指认.室温下,由于声子以及其他因素的影响,有些光

图2 室温下 3000—8000 cm⁻¹ 范围的 Nd³⁺:GSAG 的透射光谱图3 室温下 8000—14000 cm⁻¹ 范围的 Nd³⁺:GSAG 的透射光谱图4 室温下 14000—25000 cm⁻¹ 范围的 Nd³⁺:GSAG 的透射光谱

谱线会发生加宽和重叠. 透射光谱中有些比较弱的吸收峰不容易被指认, 因此我们在分析光谱时选择的是比较明显的吸收峰, 并标于各个透射光谱图之中. 为了便于说明吸收峰的来源, 每个 $^{2S+1}L_J$ 在晶场中分裂的 Stark 能级由低到高分别以 1, 2, 3... 来

图5 室温下 25000—31250 cm⁻¹ 范围的 Nd³⁺:GSAG 的透射光谱

标志.

在 Nd³⁺ 离子的各个光谱项中, 最强峰对应的波数为 12361 cm⁻¹, 来自于 $^4I_{9/2}(1) \rightarrow ^4F_{5/2}(1)$ 的跃迁. 此外在最强峰的左侧也出现了两个相对较弱的次强峰, 分别位于波数 12246 cm⁻¹, 12174 cm⁻¹. 据此我们可以判定分别来自于 $^4I_{9/2}(2) \rightarrow ^4F_{5/2}(1)$, $^4I_{9/2}(3) \rightarrow ^4F_{5/2}(1)$ 的跃迁, 因此可定出基态的最低 3 个 Stark 子能级的位置分别在 0, 115, 187 cm⁻¹. 由于在室温下基态的前 3 个能级占据了大部分的粒子, 以下的能级指认可以以此 3 个能级为起点——指认. 例如, $^2P_{1/2}$ 在 D_2 晶场作用下不分裂, 并且能级位于 23200 cm⁻¹附近, 在图 4 中我们发现在 23200 m⁻¹附近出现了波数为 23175 cm⁻¹的吸收峰, 还出现了较之稍弱的 23063 cm⁻¹的吸收峰, 因此我们判定这两个峰分别来自于 Nd³⁺ 离子的基态 $^4I_{9/2}(1) \rightarrow ^2P_{1/2}$, $^4I_{9/2}(2) \rightarrow ^2P_{1/2}$ 的跃迁, 能级的指认在几个波数之间可以认为是合理的. 对室温下 Nd³⁺:GSAG 透射光谱的吸收峰 $^4I_{9/2}(i) \rightarrow ^{2S+1}L_J(j)$ 的跃迁指认的结果列于表 2, 由于噪声的影响, 本文并没有给出 $^2H_{11/2}(2)$, $^2D_{5/2}(1)$, $^2P_{3/2}$ 的能级指认.

3.2. 能级的晶场拟合

稀土离子参数化 Hamilton 可以表示为下列形式:

$$\begin{aligned}
 H = & H_0 + \sum_{k=0,2,4,6} F^k(4f,4f)f_k + \zeta A_{so} \\
 & + \alpha L(L+1) + \beta G(G_2) + \gamma G(R_7) \\
 & + \sum_{i=2,3,4,6,7,8} t_i T^i + \sum_{h=0,2,4} m_h M^h \\
 & + \sum_{f=2,4,6} p_f P^f + \sum_{k,q} B_q^k C_q^{(k)}. \quad (1)
 \end{aligned}$$

表 2 室温下 Nd³⁺:GSAG 透射光谱的吸收峰的跃迁指认

^{2S+1} L _J	E _{ij} /cm ⁻¹	i-j	E _j /cm ⁻¹	^{2S+1} L _J	E _{ij} /cm ⁻¹	i-j	E _j /cm ⁻¹	
⁴ I _{13/2}	3923	1-2	3923	² G _{7/2}	17010	1-2	17010	
	4037	1-3	4037		17065	1-3	17065	
	4277	2-6	4392 *		17289	1-2	17289	
	4153	3-5			17394	3-4		
	4201	3-6			17467	2-4		
	4351	1-5	4351		17581	1-4	17581	
	4463	1-7	4463		⁴ G _{7/2}	18563	3-1	
	⁴ I _{15/2}	5651	2-1			18653	2-1	18768
	5766	1-1	5766	18762	2-3	18877		
	5803	1-2	5803	18850	1-2	18850		
	5943	1-3	5943	18997	1-4	18997		
	5993	1-4	5993	19402	1-4	19402		
	6521	1-5	6521	² K _{13/2}	19589	1-8	19589	
	6418	3-7			与 ⁴ G _{9/2}	19798	1-11	19798
	6601	1-7	6601		20008	1-12	20008	
	6677	1-8	6677	² G _{9/2} (1)	20657	2-5	20772 *	
⁴ F _{3/2}	11301	2-1	11416 *	² D _{3/2} (1)	20802	1-6	20802	
	11511	1-2	11511	⁴ G _{11/2} , 与	21003	1-6	21003	
⁴ F _{5/2}	12174	3-1			² K _{15/2}	21101	1-8	21101
	与	12246	2-1		21514	3-16		
² H _{9/2} (2)	12361	1-1	12361		21621	2-16		
	12421	1-2	12421		21736	1-16	21736	
	12526	2-5			21801	1-17	21801	
	12571	1-4	12571		22114	1-21	22114	
	12625	1-5	12625	² P _{1/2}	22862	4-1		
	12842	1-8	12842		22999	3-1		
	⁴ F _{7/2}	13161	3-1			23063	2-1	
与		13241	2-1		23175	1-1	23175	
⁴ S _{3/2}	13349	1-1	13349	² D _{5/2} (1)				
	13443	1-2	13443	² P _{3/2}				
	13565	1-3	13565	⁴ D _{3/2}	27594	1-1	27594	
	13633	1-6	13633	与	27716	1-2	27716	
⁴ F _{9/2}	14503	2-1		⁴ D _{5/2}	27878	1-3	27878	
	14622	1-1	14622		28257	1-5	28257	
	14693	1-2	14693		
	14762	1-3	14762	² I _{11/2}	29044	1-3	29044	
	14832	1-4	14832		
	14948	1-5	14948	² L _{15/2}				
	² H _{11/2} (2)			⁴ D _{7/2} 与	29967	1-5	29967	
⁴ G _{5/2}	16895	1-1	16895	² I _{13/2}				

注:有“*”的能级位置根据基态的第二个 Stark 能级确定;有混合的^{2S+1}L_J态能量由低到高也标志为1,2,3; i-j表示⁴I_{9/2}(i)→^{2S+1}L_J(j)对应的 Stark 能级间跃迁。

涉及到的自由离子能级参数包括 Coulomb 作用参量 F^k ($k=2,4,6$), 旋轨作用参量 ζ , 组态相互作用参量 α, β, γ , 三体相互作用参量 T^i ($i=2,3,4,6,7,8$), 弱相互作用参量 M^h ($h=0,2,4$) 和 P^f ($f=2,4,6$), (1) 式各项物理意义详见文献 [11].

由于在 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 中, Nd^{3+} 离子取代 Gd^{3+} 离子占据的是位置点群 D_2 , 在 D_2 对称性下, 晶场 Hamilton 算符具体可以写成如下形式:

$$H_{\text{CF}} = B_0^2 C_0^2 + B_0^4 C_0^4 + B_0^6 C_0^6 + B_2^2 (C_2^2 + C_{-2}^2) + B_2^4 (C_2^4 + C_{-2}^4) + B_2^6 (C_2^6 + C_{-2}^6) + B_4^4 (C_4^4 + C_{-4}^4) + B_4^6 (C_4^6 + C_{-4}^6) + B_6^6 (C_6^6 + C_{-6}^6), \quad (2)$$

其中拟合涉及独立的晶场参量 $B_0^2, B_2^2, B_2^4, B_2^6, B_4^4, B_4^6, B_6^6$ 共 9 个, 它们将和准自由离子能级参量一道作为拟合参量对实验能级进行拟合.

根据能级指认的结果, 结合文献 [12], 采用由 Reid 编写的 fshell 程序对 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 的能级进行拟合. 在 fshell 程序中晶场参数 B_q^k 采用的是定义式

$$H_{\text{CF}} = \sum_{k,q} B_q^k C_q^{(k)}, \quad (3)$$

其中 $C_q^{(k)} = \sum_i \mathbf{c}_q^{(k)}(i) = \sum_i \langle f \| \mathbf{c}^{(k)} \| f \rangle \mathbf{u}_q^{(k)}(i)$.

这里 $\mathbf{c}_q^{(k)}(i), \mathbf{u}_q^{(k)}(i)$ 分别为单电子的球张量算符和单位球张量算符.

初始设定的经验参数值采用 Gruber 等 [12] 采用的 $\text{Nd}^{3+}:\text{YSAG}$ 的能级参数, 但文献 [12] 中给出的各个晶场参数 B_{kq} 是根据定义式

$$H_{\text{CF}} = \sum_{k,q} B_{kq} U_q^{(k)} \quad (4)$$

得到的, 其中 $U_q^{(k)} = \sum_i \mathbf{u}_q^{(k)}(i)$, 这两种晶场 Hamilton 定义式中的晶场参数 B_q^k 和 B_{kq} 的关系为:

$$B_{kq} = B_q^k \langle f \| \mathbf{c}^{(k)} \| f \rangle = B_q^k (-7) \begin{pmatrix} 3 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

由此可由 B_{kq} 计算 B_q^k , 作为 fshell 程序的拟合初始参数.

拟合过程中不断调整各个拟合参数的值, 拟合时选出的 68 个实验能级中, 实验值和拟合值之间符合得很好, 标准偏差仅为 16.7 cm^{-1} , 得出最好的能级参数列于表 3, 拟合计算的 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 能级结果列于表 4.

表 3 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 的能级参数/ cm^{-1}

EAVG	24171 (5)	γ	[1419]	B_{20}	709(49)
F^2	71793(57)	T^2	[207]	B_{22}	190(28)
F^4	52190(86)	T^3	[47]	B_{40}	-144(99)
F^6	35593(84)	T^4	[51]	B_{42}	-1953(45)
ξ	877.6(0.93)	T^6	[-259]	B_{44}	-811(66)
		T^7	[231]	B_{60}	-1598(77)
		T^8	[204]	B_{62}	-718(53)
α	[20.9]	M^0	[2.36]	B_{64}	765(60)
β	[-661]	P^2	[233]	B_{66}	-662(66)

注: a) () 内表示参数变化的幅度, [] 内表示在拟合过程中固定的参量; b) $M^2 = 0.56M^0, M^4 = 0.38M^0, P^4 = 0.75P^2, P^6 = 0.5P^2$.

表 4 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 晶体中 Nd^{3+} 离子的能级

$^{2S+1}L_J$	能级编号	E/cm^{-1}			$^{2S+1}L_J$	能级编号	E/cm^{-1}		
		计算值	实验值	Δ/cm^{-1}			计算值	实验值	Δ/cm^{-1}
$^4I_{9/2}$	1	2	0	-2	$^4I_{13/2}$	8	2102	2114 [a]	12
	2	126	115	-11		9	2137	2144 [a]	7
	3	196	187	-9		10	2410	2422 [a]	12
	4	322	316 [a]	-6		11	2477	2492 [a]	15
	5	804	808 [a]	4		12	3901	3904 [a]	1
$^4I_{11/2}$	6	1975	1979 [a]	5	13	3915	3923	8	
	7	2011	2023 [a]	12	14	4034	4037	3	

续表 4

^{2S+1} L _J	能级编号	E/cm ⁻¹		Δ/cm ⁻¹	^{2S+1} L _J	能级编号	E/cm ⁻¹		Δ/cm ⁻¹
		计算值	实验值				计算值	实验值	
	15	4051	4061	10					
	16	4379	4351	-28					
	17	4395	4391	-4					
	18	4459	4463	4					
⁴ I _{15/2}	19	5771	5766	-5	² K _{13/2}	65	19141		
	20	5809	5803	-6	与	66	19278		
	21	5955	5943	-12	⁴ G _{9/2}	67	19336		
	22	5999	5993	-6		68	19389	19402	13
	23	6512	6521	9		69	19439		
	24	6549				70	19518		
	25	6605	6601	-4		71	19533		
	26	6695	6677	-18		72	19596	19589	-7
⁴ F _{3/2}	27	11407	11416	9		73	19648		
	28	11503	11511	8		74	19770		
⁴ F _{5/2}	29	12360	12361	1	² G _{9/2} (1)	77	20753	20772	19
与	30	12430	12421	-9	² D _{3/2} (1)	78	20827	20802	-25
² H _{9/2} (2)	31	12458			⁴ G _{11/2}	79	20844		
	32	12589	12571	-18	与	80	20856		
	33	12635	12625	-10	² K _{15/2}	81	20978		
	34	12681				82	21013	21003	-10
	35	12776				83	21067		
	36	12828	12842	14		84	21102	21101	-1
⁴ F _{7/2}	37	12357	12349	-8		85	21174		
与	38	13439	13443	4		86	21178		
⁴ S _{3/2}	39	13568	13565	-3		87	21424		
	40	13589				88	21481		
	41	13605				89	21605		
	42	13642	13633	-9		90	21654		
⁴ F _{9/2}	43	14636	14622	-14		91	21679		
	44	14697	14693	-4		92	21733	21736	3
	45	14750	14762	12		93	21762		
	46	14817	14832	15		94	21803	21801	-2
	47	14926	14948	22		95	21840		
² H _{11/2} (2)	48	15880				96	21863		
	49	15906			² P _{1/2}	97	22052	22114	62
	50	15929			² D _{5/2} (1)	98	23170	23175	5
	51	15939				99	23631		
	52	16006				100	23741		
	53	16043				101	23853		
⁴ G _{5/2}	54	16894	16895	1	² P _{3/2}	102	26032		
	55	16999	17010	11		103	26138		
	56	17071	17065	-6	⁴ D _{3/2}	104	27569	27594	25
⁴ G _{7/2}	57	17223			与	105	27713	27716	3
	58	17271			⁴ D _{5/2}	106	27868	27878	10
	59	17301	17289	-12		107	28165		
	60	17575	17581	6	...	108	28300	28257	-43
⁴ G _{7/2}	61	18749	18768	19	² I _{11/2}	112	29046	29044	-2
	62	18862	18850	-12	...				
	63	18883	18877	-6	² L _{15/2} ,	120	29969	29967	-2
	64	18994	18997	3	⁴ D _{7/2} , 与 ² I _{13/2}				
								N = 68	σ = 16.7

注:[a] 文献[8].

4. 结 论

用提拉法成功生长出了 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 激光晶体, 分析了 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 激光晶体在室温下的透射光谱, 指认出了 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 晶体中的 68 个晶场能级. 用 fshell 程序对实验能级进行了拟合计算, 拟合计算的

能级与实验的能级吻合得较好, 标准偏差为 16.7 cm^{-1} , 通过拟合给出了 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 的晶场参数, 为进一步研究 $\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$ 光谱、发光及激光特性奠定基础.

感谢 Ried 所提供的 fshell 程序, 感谢马崇庚博士在能级拟合中给予的帮助.

-
- [1] Wulfmeyer V, Bauer H, Di Girolamo P, Serio C 2005 *Remote Sens. Environ.* **95** 211
- [2] Treichel R, Czeranowsky C, Heri B, Petermann K, Huber G 2004 *Proceedings of the 5th International Conference on Space Optics (ICSO 2004)* Toulouse, France 30 March—2 April 2004 (ESA SP-554, June 2004) p639
- [3] Eichler H J, Kallmeyer F, Rhee H, Riesbeck T, Strohmaier S 2007 *Proc. SPIE* **6346** 63460Y-1
- [4] Wang Z P, Shao Y P, Xu X G, Wang J Y, Liu Y G, Wei J Q, Shao Z S 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2029 (in Chinese) [王正平、邵耀鹏、许心光、王继扬、刘耀岗、魏景谦、邵宗书 2002 物理学报 **51** 2029]
- [5] Wu D E, Zhou R, Zhang X H, Ding X, Yao J Q, Yan C F, Zhang G Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1196 (in Chinese) [武丁二、周睿、张晓华、丁欣、姚建铨、颜彩繁、张光寅 2006 物理学报 **55** 1196]
- [6] Liu H, Yao J Q, Zheng F H, Lu Y, Wang P 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 230 (in Chinese) [刘欢、姚建铨、郑芳华、路洋、王鹏 2008 物理学报 **57** 230]
- [7] Strohmaier S G P, Eichler H J, Czeranowsky C, Ileri B, Petermann K, Huber G 2007 *Opt. Commun.* **275** 170
- [8] Kaminskii A A 1996 *Crystalline Lasers: Physical Processes and Operating Schemes* (Boca Raton: CRC Press) p145
- [9] Wang C, Chen X B, Zhang C L, Zhang Y Z, Chen L, Ma H, Li S, Gao A H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6090 (in Chinese) [王策、陈晓波、张春林、张蕴芝、陈鸾、马辉、李崧、高爱华 2007 物理学报 **56** 6090]
- [10] Chen X Y, Luo Z D 1999 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Edition) **8** 607
- [11] Carnall W T, Goodman G L, Rajnak K, Rana R S 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 3443
- [12] Gruber J B, Hills M E, Allik T H, Jayasankar C K, Quagliano J R, Richardson F S 1990 *Phys. Rev.* **B 41** 7999

Crystal field energy-levels of $\text{Nd}^{3+}:\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ and fitting*

Xiao Jin¹⁾³⁾ Zhang Qing-Li^{1)†} Zhou Wen-Long¹⁾ Tan Xiao-Liang¹⁾ Liu Wen-Peng¹⁾
Yin Shao-Tang¹⁾ Jiang Hai-He¹⁾²⁾ Xia Shang-Da³⁾ Guo Chang-Xin³⁾

1) (*Anhui Provincial key Laboratory of Optical Devices and Materials, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

2) (*Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

3) (*Physics Department, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

(Received 26 October 2009; revised manuscript received 28 January 2010)

Abstract

$\text{Nd}^{3+}:\text{GSAG}$, a laser crystal of 942 nm with good performance, was grown by Czochralski method successfully, and its transmission spectra at room temperature were studied. Sixty-eight crystal field splitting levels of Nd^{3+} with the maximum up to 29967 cm^{-1} were identified, to which the Hamiltonian parameters of free-ion and crystal field were fitted, and the root-mean-square deviation of energy level fitting is 16.7 cm^{-1} , which indicated that the experimental and calculated energy levels are well consistent. The obtained Hamiltonian parameters can be used to calculate the wavefunctions of Nd^{3+} in GSAG, predict its energy level splitting, study the luminescent properties and so on.

Keywords: crystal field, energy level splitting, transmission spectrum, crystal growth

PACC: 7170C, 7170, 8110

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50772112, 90922003, 50872135) and the Natural Science Fund of Anhui Province, China (Grant No. 08040106820).

† Corresponding author. zql@aiofm.ac.cn