

## MÔ PHÒNG SƠ ĐỒ NHIỆT NGUYÊN LÝ NHÀ MÁY ĐIỆN HẠT NHÂN

**Hoàng Dương Hùng**

*Trường Đại học Quảng Bình*

**Phạm Duy Vũ**

*Trường Đại học Bách Khoa, Đại học Đà Nẵng*

**Tóm tắt.** Sử dụng phần mềm mô phỏng chuyên dụng để mô phỏng các thiết bị nhiệt trong nhà máy điện hạt nhân là một trong những phương án cần ưu tiên nghiên cứu trong điều kiện nước ta hiện nay. Nhóm nghiên cứu đã thực hiện mô phỏng thành công một sơ đồ nhiệt nguyên lý nhà máy điện hạt nhân VVER -440. Trên sơ đồ mô phỏng, người sử dụng có thể theo dõi trực tiếp các thông số nhiệt động học của môi chất, các thông số liên quan đến tính toán thiết kế thiết bị trao đổi nhiệt như diện tích, hệ số truyền nhiệt, độ chênh nhiệt độ logarit. Các kết quả mô phỏng phù hợp với các thiết bị thực tế.

**Từ khóa:** nhà máy điện hạt nhân; mô phỏng, thiết kế; vận hành; thiết bị trao đổi nhiệt

### 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Một trong các thiết bị chính trong nhà máy điện hạt nhân là các thiết bị trao đổi nhiệt. Môi chất sử dụng trong chu trình nhiệt là nước. Vì vậy, trong quá trình tính toán thiết kế cũng như vận hành thiết bị, các thông số nhiệt động của môi chất nước và thông số kỹ thuật của thiết bị như công suất nhiệt, diện tích bề mặt và kiểu trao đổi nhiệt, trở lực qua thiết bị cần được xác định.

Quá trình mô phỏng thực chất là quá trình tính toán trên cơ sở các mô hình nhiệt động học kết hợp với các yêu cầu và tiêu chuẩn của từng loại thiết bị, là quá trình thực nghiệm trên mô hình nhằm thay thế đối tượng nghiên cứu thực tế, thu nhận các thông tin quan trọng về công nghệ và thiết bị. Thực hiện mô phỏng các thiết bị trong nhà máy điện hạt nhân để tính toán, thiết kế, theo dõi các thông số vận hành là một trong những phương án cần ưu tiên nghiên cứu trong các cơ sở đào tạo.

Với việc sử dụng các công cụ mô phỏng, người sử dụng có thể thay đổi các công suất cũng như các thông số đầu vào của từng thiết bị. Kết quả mô phỏng cho phép chúng ta hiển thị và khai thác các thông số kỹ thuật của thiết bị cũng như thông số nhiệt động học của môi chất trong chu trình. Các thông số này cũng có thể được hiển thị trực tiếp trên chu trình đã được thiết lập.

## 2. GIẢI QUYẾT VẤN ĐỀ

### 2.1. Cơ sở sử dụng phần mềm mô phỏng

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phần mềm mô phỏng PRO/II, đây là một công cụ mô phỏng trạng thái ổn định nhằm hỗ trợ quá trình thiết kế của quá trình sản xuất cũng như phân tích hoạt động của các thiết bị và công nghệ. PRO/II cho phép thực hiện các tính toán chi tiết cân bằng vật chất và cân bằng năng lượng của một quá trình cũng như các tính chất vật lý quan trọng của môi chất. Phần mềm này được sử dụng khá rộng rãi trong mô phỏng các quá trình của công nghệ hóa học cũng như các quá trình sản xuất các dòng phụ trợ. Để thực hiện các nhiệm vụ này, người ta đã sử dụng kết hợp các thư viện cơ sở dữ liệu phong phú các hợp chất hóa học và các mô hình nhiệt động học nhằm có thể tính toán các tính chất nhiệt động của các đơn chất cũng như hỗn hợp. Kết quả thu được trên phần mềm mô phỏng này là toàn diện, tin cậy và chính xác, do đó hiện nay phần mềm này thường được sử dụng trong các trường hợp sau:

- Mô phỏng sơ đồ công nghệ và thiết kế kỹ thuật nhà máy;
- Phân tích sản xuất đường ống;
- Phân tích vận hành, tối ưu hóa và điều khiển quá trình;
- Mô phỏng động và đào tạo vận hành.

### 2.2. Chọn phương trình nhiệt động

Lựa chọn phương trình nhiệt động lực học thích hợp với cấu tử của chu trình là yếu tố quan trọng nhất trong giải quyết một vấn đề mô phỏng. Nếu chọn sai mô hình nhiệt động thì kết quả sẽ sai hoặc không hợp lệ. Sự lựa chọn không phù hợp của mô hình nhiệt động là nguyên nhân lớn nhất xảy ra các lỗi trong quá trình mô phỏng, do đó kết hợp với kinh nghiệm và đánh giá kỹ thuật để kiểm tra xem kết quả có hợp lý không. Phần mềm mô phỏng PRO/II cung cấp rất nhiều công cụ để xây dựng mô hình và tính toán tính chất nhiệt động lực học.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng mô hình nhiệt động học hỗn hợp: UNIFAC và Peng – Robinson. Mô hình UNIFAC (UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients) là một hệ nhiệt động bán thực nghiệm dùng để mô phỏng hệ số hoạt độ các chất không điện ly ( $\gamma_i$ ) trong các hỗn hợp lỏng không lý tưởng theo phương trình sau:

$$\ln \gamma = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^r,$$

trong đó  $\gamma_i^c$  và  $\gamma_i^r$  là hệ số hoạt độ tổ hợp và hệ số hoạt độ ‘dư’ (residual) của cấu tử  $i$  trong hỗn hợp.

Phương trình Peng – Robinson là dẫn xuất của phương trình trạng thái khí thực có dạng tổng quát là:

$$P = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a(T)}{(v^2 + ubv + wb^2)},$$

trong đó  $P$ ,  $T$ ,  $v$  lần lượt là áp suất, nhiệt độ và thể tích mol của một cấu tử hoặc hỗn hợp.

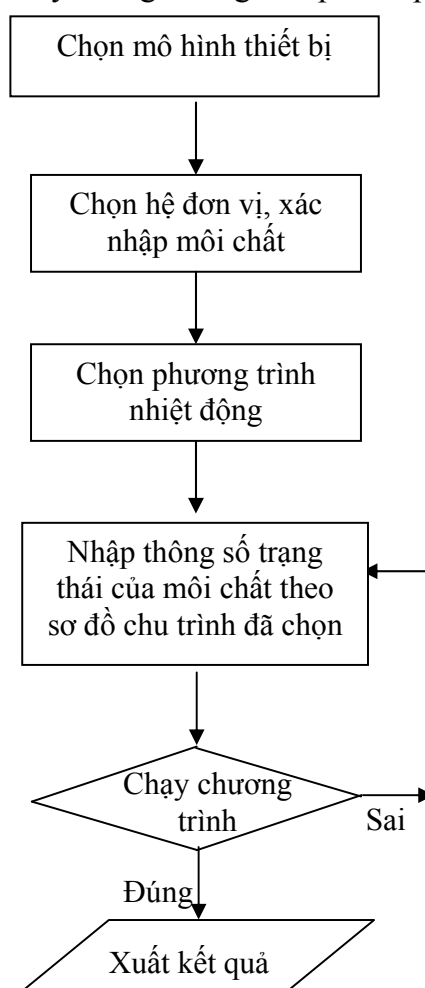
Trong quá trình mô phỏng, mô hình UNIFAC kết hợp với cơ sở dữ liệu sẽ cho phép tính toán chính xác các tính chất của pha lỏng vì các phân tử nước, cấu tử chính sử dụng trong đề tài này, có tương tác với nhau rất mạnh do đặc tính lưỡng cực của nó. Pha hơi có áp suất rất cao nên mô hình lý tưởng không còn phù hợp và mô hình trạng thái khí thực Peng – Robinson đã được chọn để bảo đảm tính chính xác của các kết quả tính toán và mô phỏng.

### 2.3. Xây dựng các bước thiết lập mô phỏng thiết bị trao đổi nhiệt

Các bước tiến hành để thực hiện quá trình mô phỏng của chu trình nhiệt được mô tả trên sơ đồ ở Hình 1. Trên cơ sở vai trò, nguyên lý làm việc của mỗi thiết bị ta chọn loại mô hình thích hợp cho thiết bị đó. Kết hợp với môi chất là nước và các thông số trạng thái của môi chất trong mỗi thiết bị ta nhập thông số đầu vào cho chương trình.

Sử dụng phần mềm chuyên dụng Pro/II cho phép ta thực hiện mô hình hóa từng thiết bị trao đổi nhiệt và các thiết bị khác trong chu trình nhiệt của nhà máy điện hạt nhân, từ đó thiết lập được sơ đồ nhiệt hoàn chỉnh với toàn bộ các thiết bị trong chu trình nhiệt.

Kết quả chương trình giúp chúng ta biết được thông số nhiệt động học của môi



**Hình 1. Sơ đồ các bước thiết lập mô phỏng và tính toán thiết bị trao đổi nhiệt**

chất trong mỗi thiết bị cũng như các thông số thiết kế và vận hành thiết bị. Từ mô hình này, chúng ta có thể thay đổi các dữ kiện đầu vào để có thể tối ưu hóa cấu hình cũng như chế độ vận hành của thiết bị.

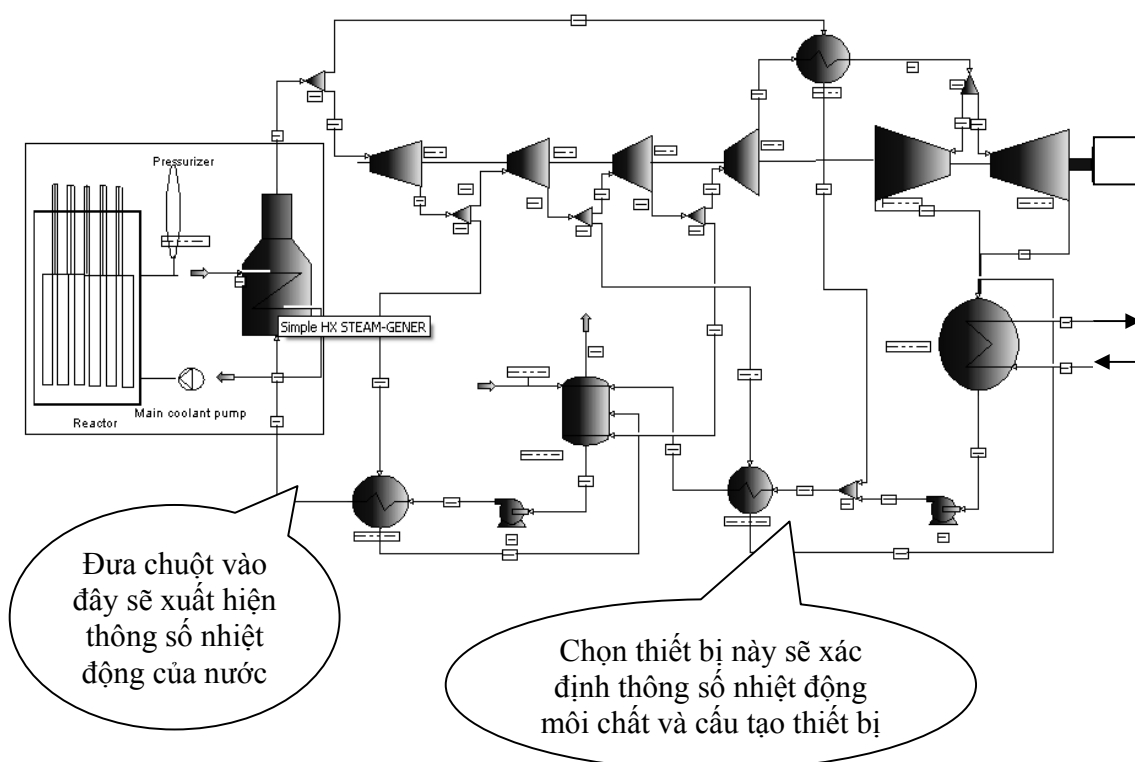
### 3. KẾT QUẢ VIỆC NGHIÊN CỨU

#### 3.1. Thiết lập sơ đồ nhiệt nguyên lý nhà máy điện hạt nhân

Trên cơ sở sơ đồ nhiệt nguyên lý hiện có của tổ máy VVER 440 nhà máy điện hạt nhân Park [1], tiến hành theo các bước thiết lập mô phỏng trên Hình 1. Kết quả mô phỏng như trên Hình 2.

Trên sơ đồ mô phỏng thiết bị nhiệt trong nhà máy điện hạt nhân, người sử dụng muốn biết các thông số trạng thái của môi chất ở bất kỳ vị trí nào trong chu trình hay các thông số động học của môi chất cũng như thông số điện tích, công suất nhiệt của thiết bị trao đổi nhiệt chỉ cần chọn đối tượng và chọn chức năng hiển thị thì tất cả thông số trên sẽ xuất hiện trên màn hình. Đây là một trong những ưu điểm của chương trình, giúp người vận hành, tính toán dễ dàng theo dõi cũng như quản lý các số liệu của chu trình.

Việc thay đổi công suất của các thiết bị cũng như các điều kiện vận hành, các thông số đầu vào của từng loại thiết bị hoặc thiết kế lại thiết bị chỉ cần lựa chọn đối tượng cần thay đổi và thực hiện việc khai báo thông số đầu vào rồi chạy mới chương trình.



Hình 2. Mô phỏng sơ đồ nhiệt nguyên lý trong nhà máy điện hạt nhân

### 3.2. Tính toán thiết kế bình ngưng

Các thiết bị trao đổi nhiệt trong chu trình nhiệt của nhà máy điện hạt nhân như bình sinh hơi, bình ổn áp, bình gia nhiệt tách ẩm, bình ngưng, bình gia nhiệt nước cấp đã được mô hình hóa và mô phỏng cho phép chúng ta xác định được công suất, điều kiện vận hành cũng như các đại lượng vật lý quan trọng của các lưu chất trong thiết bị đó như: chênh lệch nhiệt độ trung bình logarit, diện tích bề mặt trao đổi nhiệt, entanpy, hệ số nhiệt dung Cp. Kết quả này chính là các dữ liệu cần thiết để thiết kế các thiết bị tương ứng.

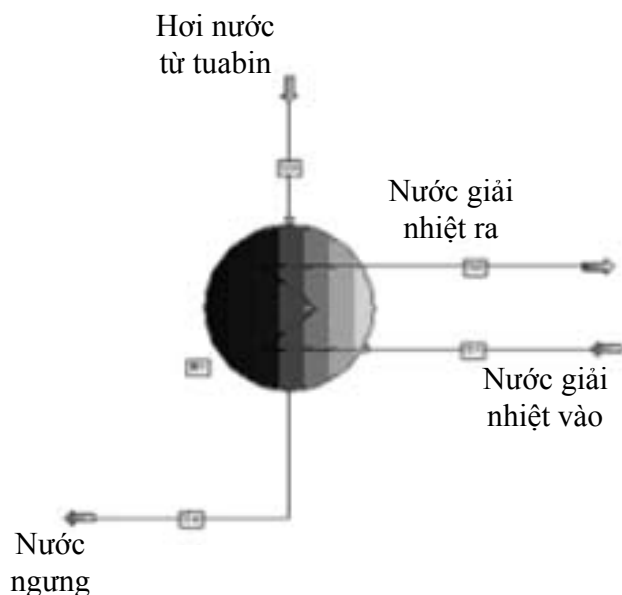
Trong khuôn khổ bài báo này, chúng tôi chỉ trình bày các kết quả mô phỏng bình ngưng.

#### 3.2.1. Thiết lập mô hình mô phỏng

##### ➤ Các dữ liệu đầu vào:

- Nước giải nhiệt: nhiệt độ vào  $t = 12^{\circ}\text{C}$ , nhiệt độ ra  $t = 15^{\circ}\text{C}$ , áp suất  $p = 15$  bar, lưu lượng  $D = 44.000 \text{ m}^3/\text{h}$ .
- Hơi nước vào bình ngưng: nhiệt độ  $t = 76^{\circ}\text{C}$ , áp suất 0,04 bar, lưu lượng: 260 tấn/h.
- Nước ngưng: nhiệt độ  $t = 25^{\circ}\text{C}$ .

##### ➤ Thiết lập mô hình mô phỏng:



Hình 3. Mô hình mô phỏng thiết bị ngưng tụ

### 3.2.2. Kết quả mô phỏng

**Bảng 1. Tóm tắt kết quả thực hiện mô phỏng thiết bị bình ngưng**

| STT | Đại lượng                            | Đơn vị                 | Giá trị    |
|-----|--------------------------------------|------------------------|------------|
| 1   | Công suất nhiệt                      | KJ/hr                  | $680.10^6$ |
| 2   | Độ chênh nhiệt độ trung bình logarit | $^{\circ}\text{C}$     | 29,64      |
| 3   | Hệ số hiệu chỉnh                     | ---                    | 0,995      |
| 4   | Hệ số trao đổi nhiệt                 | KW/(m <sup>2</sup> .K) | 3,5        |
| 5   | Diện tích trao đổi nhiệt             | m <sup>2</sup>         | 1820       |

## 4. KẾT LUẬN

Qua kết quả nghiên cứu ta thấy việc sử dụng phần mềm mô phỏng các thiết bị trao đổi nhiệt trong chu trình nhiệt nhà máy điện hạt nhân là hoàn toàn khả thi. Việc mô hình hóa này cho phép thực hiện các quá trình tính toán thiết kế nhanh chóng, chính xác. Kết quả chương trình cho ta biết được các thông số nhiệt động của môi chất, kích thước hình học cơ bản của thiết bị, từ đây người sử dụng có thể thiết kế chi tiết các thiết bị mong muốn.

Việc mô phỏng sơ đồ nhiệt nguyên lý nhà máy điện hạt nhân làm cho người sử dụng dễ dàng theo dõi các thông số trạng thái của môi chất, công suất các thiết bị và có thể can thiệp vào các điều kiện vận hành để tìm hiểu ảnh hưởng của các thông số vận hành đến hiệu quả từng thiết bị và của cả chu trình.

Vậy, ứng dụng kỹ thuật mô hình hóa trong mô phỏng hệ thống thiết bị trao đổi nhiệt của chu trình nhiệt nhà máy điện hạt nhân là một công cụ giúp người sử dụng tính toán, thiết kế thiết bị một cách nhanh chóng, hiệu quả hơn. Kết quả mô hình hóa còn phục vụ đắc lực cho quá trình nghiên cứu và đào tạo trong lĩnh vực nhà máy điện hạt nhân cũng như nhà máy nhiệt điện.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Ildikó B. (2012), *Nuclear Power Plants*, Budapest University of Technology and Economics.
- [2] Viện Năng lượng nguyên tử Việt Nam (2011), *Tổng quan hệ thống công nghệ nhà máy điện hạt nhân*, Bộ Khoa học và Công nghệ.
- [3] Nuclear Training Center – Korea Atomic Energy Research Institute.  
<http://www.kntc.re.kr/openlec/nuc/NPRT/>.
- [4] Typical Overall Heat Transfer Coefficients (U-Values)  
[-http://www.engineeringpage.com/technology/thermal/transfer.html](http://www.engineeringpage.com/technology/thermal/transfer.html).

## SIMULATING PRINCIPLE HEAT DIAGRAM OF NUCLEAR POWER PLANT

***Hoang Duong Hung***

*Quang Binh University*

***Pham Duy Vu***

*Da Nang University of Technology*

***Abstract.*** *Using software which simulates heat exchange equipments in a nuclear power plants is necessary. It used to compute, design and observe operational parameters. We simulated successfully principle heat diagram of VVER -440 nuclear power plants. On the simulative diagram, users can directly track the thermodynamic parameters of the water that connect to designing and computation fluids as area, heat transfer, logarithm temperature. The simulative results are suitable with experience.*

***Keywords:*** *nuclear power plants; simulation; design; operation; heat exchanger*

# PHÂN TÍCH CÁC CHUYỂN DỜI HẤP THỤ VÀ BỨC XẠ CỦA ION $\text{Sm}^{3+}$ TRONG THUỖ TINH BORATE KIM LOẠI KIỀM ( $67\text{H}_3\text{BO}_3 \cdot 12\text{Li}_2\text{O}_3 \cdot 20\text{K}_2\text{CO}_3 \cdot 1\text{Sm}_2\text{O}_3$ ) BẰNG LÝ THUYẾT JUDD – OFELT

**Trần Ngọc**

*Trường Đại học Quảng Bình*

**Tóm tắt.** Phổ hấp thụ và bức xạ của ion  $\text{Sm}^{3+}$  trong thủy tinh borate kim loại kiềm ( $67\text{H}_3\text{BO}_3 \cdot 12\text{Li}_2\text{O}_3 \cdot 20\text{K}_2\text{CO}_3$ ) đã được nghiên cứu. Phổ hấp thụ của ion  $\text{Sm}^{3+}$  quan sát được hai dải: trong vùng năng lượng cao (tại 404nm; 474 nm) và trong vùng năng lượng thấp (tại 1070nm, 1220nm, 1365nm, 1480nm, 1582nm và 1890nm). Phổ huỳnh quang quan sát được gồm 4 dải tại 560nm, 600nm 650nm và 710nm tương ứng với các dịch chuyển từ mức kích thích  $^4G_{5/2}$  về các mức  $^6H_{5/2}$ ,  $^6H_{7/2}$ ,  $^6H_{9/2}$  and  $^6H_{11/2}$ . Các kết quả phân tích bằng cách sử dụng lý thuyết Judd-Ofelt cho ta giá trị các thông số cường độ  $\Omega_2$ ,  $\Omega_4$  và  $\Omega_6$ , các thông số bức xạ: xác suất chuyển dời ( $A_R$ ), hệ số phân nhánh ( $\beta_R$ ), thời gian sống bức xạ ( $\tau_R$ ) và tiết diện phát xạ ( $\sigma_p$ ) đã được tính cho mức kích thích.

**Từ khoá:** Thủy tinh borate kim loại kiềm.

## 1. GIỚI THIỆU

Trong những năm gần đây, một trong những lĩnh vực được quan tâm nghiên cứu là tìm kiếm vật liệu tối ưu để chế tạo các linh kiện quang học dùng trong viễn thông, sợi quang, khuếch đại quang học, laser rắn, hiển thị 3D, các thiết bị nhớ, thiết bị màn hình siêu phẳng, bộ cảm biến UV,... [4]. Phần lớn các thiết bị này hoạt động trong vùng hồng ngoại cũng như trong vùng ánh sáng nhìn thấy và hiện đang được phổ biến rộng rãi với các yêu cầu ngày càng cao về sự đa dạng của nó. Các nghiên cứu cho thấy, để tạo ra những vật liệu như vậy, người ta thường chọn nền là các vật liệu thủy tinh trong suốt thuộc họ borate hoặc họ oxide – fluoride và các tạp chất được pha là các nguyên tố đất hiếm (RE).

Thủy tinh borate kim loại kiềm với các thành phần:

$67\text{H}_3\text{BO}_3 \cdot 12\text{Li}_2\text{O}_3 \cdot 20\text{K}_2\text{CO}_3 \cdot 1\text{Sm}_2\text{O}_3$  tập trung các ưu điểm như: năng lượng phonon thấp, ổn định cơ, nhiệt, hóa của các oxide nói chung và đặc biệt là có độ trong suốt cao, điểm nóng chảy thấp và độ hòa tan ion đất hiếm tốt [9]. Ion  $\text{Sm}^{3+}$  ( $4f^5$ ) trong trường thủy tinh borate thường phát các vạch bức xạ hẹp, có thời gian sống dài ở các trạng thái kích thích [3, 8]. Đây là một trong các vật liệu RE được sử dụng nhiều để sản xuất các thiết bị trong lĩnh vực chiếu sáng vùng nhìn thấy (chủ yếu trong vùng ánh sáng đỏ). Vật liệu này có thể dùng như một đầu dò hiệu quả để đánh giá các môi trường cục bộ xung quanh ion RE, vì các chuyển dời f – f của nó cung cấp rất nhiều thông tin hữu ích về cấu trúc xung quanh ion đó [2, 3, 7].



Trong bài báo này, chúng tôi giới thiệu công nghệ chế tạo vật liệu thủy tinh borate kim loại kiềm pha tạp  $\text{Sm}^{3+}$  bằng phương pháp nóng chảy và các kết quả nghiên cứu tính chất quang trên vật liệu này thông qua việc phân tích các đại lượng vật lý bằng cách sử dụng lý thuyết Judd-Ofelt (JO).

## 2. THỰC NGHIỆM

### 2.1. Chế tạo thủy tinh borat kim loại kiềm pha tạp $\text{Sm}^{3+}$

+ *Phối liệu và thành phần*: Hóa chất ban đầu gồm:  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{K}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{H}_3\text{BO}_3$  và  $\text{Sm}_2\text{O}_3$  là các loại hóa chất sạch dùng trong phân tích, được cân với khối lượng thích hợp theo tỷ lệ hợp phần của mẫu dự kiến:  $67\text{H}_3\text{BO}_3 - 12\text{Li}_2\text{CO}_3 - 20\text{K}_2\text{CO}_3 - 1\text{Sm}_2\text{O}_3$ .

+ *Quy trình chế tạo*: Mẫu được chế tạo theo phương pháp nóng chảy, theo quy trình:

- 1) Trộn đều các tiền chất với nhau bằng cách nghiền trong cối mã nỏ (khoảng 1 giờ).
- 2) Hỗn hợp được nung trong cốc thạch anh từ nhiệt độ phòng lên đến  $1020^\circ\text{C}$ , giữ ở nhiệt độ này trong 1,5 giờ và làm nguội chậm xuống nhiệt độ phòng bằng cách tắt lò.
- 3) Cắt, mài, đánh bóng sản phẩm dạng khối tròn kích thước: chiều dày  $d = 0,98\text{mm}$ , bán kính  $r = 6,5\text{mm}$  (dùng cho các phép đo chiết suất  $n$ , khối lượng riêng, hấp thụ và huỳnh quang); nghiền nhỏ và sàng tuyển lấy các hạt có kích thước từ 76 đến  $150\ \mu\text{m}$  với sản phẩm dạng bột (dùng cho nhiễu xạ tia X).
- 4) Cuối cùng các sản phẩm được ủ  $350^\circ\text{C}$  trong 3 giờ để ổn định cấu trúc. Sản phẩm sau khi ủ, bằng mắt thường thấy trong suốt, đồng đều, không có bọt.

### 2.2. Các phép đo khảo sát tính chất của vật liệu

+ Phép đo chiết suất  $n$  được thực hiện trên hệ khúc xạ kế Abbe ở bước sóng của Nari, 589 nm với  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{Br}$  (1- bromonaphthalin) dùng như chất lỏng tiếp xúc.

+ Phép đo khối lượng riêng thực hiện bằng phương pháp Archimede, sử dụng Xylene làm dung dịch ngâm mẫu.

+ Phổ hấp thụ của  $\text{Sm}^{3+}$  trong nền thủy tinh borate LPG được ghi ở nhiệt độ phòng trên hệ quang phổ kế Varian Cary 5E UV-VIS-NIR, có bước sóng quét từ 200 nm – 2500 nm với độ phân giải 1 nm.

+ Phổ huỳnh quang của  $\text{Sm}^{3+}$  được ghi tại nhiệt độ phòng trên hệ Fluorolog-3 Model FL3-22, độ phân giải 0,3 nm, kích thích bằng ánh sáng đèn xenon (Xe) ở bước sóng 400 nm.

## 3. LÝ THUYẾT JUDD-OFELT

Lý thuyết Judd-Ofelt (JO) được xây dựng cho kim loại đất hiếm, các thông số rút

ra từ lý thuyết này cho phép ta đánh giá được nhiều đại lượng vật lý quan trọng như: cường độ các chuyển dời, thời gian sống của các chuyển dời, tiên đoán dạng phổ của các ion đất hiếm,... Ngoài ra, thông qua các thông số JO cũng cho phép ta đánh giá nhiều đặc trưng của môi trường xung quanh các ion đất hiếm như độ bất đối xứng (asymmetry), độ đồng hoá trị (covalence), độ bền chắc (rigidity),... Cơ sở của lý thuyết JO là dựa vào phổ hấp thụ và phổ huỳnh quang thực nghiệm.

### 3.1. Lực dao động tử thực nghiệm và lý thuyết JO

Đại lượng đầu tiên mà ta cần quan tâm là lực dao động tử:

+ Lực dao động tử có thể xác định được bằng công thức thực nghiệm Smakula:

$$f_{\text{exp}} = 4,318.10^{-9} \int \varepsilon(\nu) d\nu, \quad (3.1)$$

trong đó  $\varepsilon(\nu)$  là molar absorptivity ở tần số  $\nu$ . Đại lượng này được tính từ độ hấp thụ  $A$  theo công thức Lambert-Beer:

$$\varepsilon(\nu) = \frac{A(\nu)}{c \cdot d},$$

trong đó  $A(\nu)$  xác định trực tiếp từ phổ hấp thụ  $[\lg(I_0/I)]$ ;  $d$  là độ dày mẫu;  $c$  là nồng độ ion đất hiếm (mol/lít) (có thể xác định từ công thức:  $c \text{ (ion/cm}^3\text{)} = N_A \cdot d/M$  với:  $N_A$  là số Avogadro,  $d$  là tỷ trọng (mol% của ion đất hiếm) và  $M$  khối lượng phân tử).

+ Theo lý thuyết JO, biểu thức lực dao động tử của chuyển dời dipole điện từ trạng thái cơ bản  $|A\rangle$  lên trạng thái kích thích  $|B\rangle$  là:

$$f_{\text{cal}} = \frac{8\pi^2 mc}{3h} \frac{\nu}{2J+1} \frac{(n^2+2)^2}{9n} \sum_{\lambda=2,4,6} \Omega_{\lambda} \left| \langle \Psi_J | U^{\lambda} | \Psi'_{J'} \rangle \right|^2, \quad (3.2)$$

trong đó  $\Omega_{\lambda}$  gọi là thông số cường độ, nó không phụ thuộc vào chuyển dời hấp thụ hay huỳnh quang mà chỉ phụ thuộc vào cấu trúc của trường tinh thể, đại lượng này có thể tính được từ thực nghiệm. Đại lượng  $\langle \Psi_J | U^{\lambda} | \Psi'_{J'} \rangle^2$  gọi là yếu tố ma trận

rút gọn kép,  $U^{(\lambda)}$  là toán tử tenxơ đơn vị, nó chỉ phụ thuộc vào ion đất hiếm và trạng thái chuyển dời đầu - cuối. Đại lượng này có thể tính được từ lý thuyết phổ đất hiếm [1, 3, 4, 9, 10].

So sánh lực dao động tử từ hai công thức thực nghiệm và tính toán lý thuyết ta có hệ  $n$  phương trình tương ứng với  $n$  chuyển dời đang khảo sát trong phổ hấp thụ:

$$\Delta_n^{\text{exp}} = \Omega_2 U_n^2 + \Omega_4 U_n^4 + \Omega_6 U_n^6. \quad (3.3)$$

Giải hệ phương trình 3.3 bằng phương pháp bình phương tối thiểu [3] cho ta kết quả:  $\Omega_2, \Omega_4, \Omega_6$  với sai số độ lệch toàn phương trung bình là:

$$\text{rms} = \left[ \sum_i (f_{\text{edi}}^{\text{exp}} - f_{\text{edi}}^{\text{cal}})^2 / (n-3) \right]^{1/2}. \quad (3.4)$$

### 3.2. Tính chất bức xạ

Trong quá trình bức xạ huỳnh quang, xác suất chuyển dời phát xạ ngẫu nhiên từ trạng thái  $|\psi J\rangle \rightarrow |\psi' J'\rangle$  trong phổ huỳnh quang được xác định bởi:

$$A(\Psi J, \Psi' J') = A_{ed} + A_{md} \text{ Hay } A_{(R)}(\psi j, \psi' j') = \frac{64\pi^4 \nu^3}{3h(2J+1)} \left[ \frac{n(n^2+2)^2}{9n} S_{ed} + n^3 S_{md} \right] \quad (3.5)$$

Vì các vật liệu quang học là điện môi (chiết suất  $n > 1$ ), cần có số hiệu chỉnh trường cực bộ Lorentz  $\chi_{ED}$  và  $\chi_{MD}$  cho các tương tác với momen lưỡng cực điện và momen lưỡng cực từ các hệ số  $\frac{n(n^2+2)^2}{9n}$ ,  $n^3$  được đưa vào trong các biểu thức (3.3)

và (3.4), cụ thể là:

$$\begin{aligned} \chi_{ED} &= (n^2+2)^2/9n; & \chi_{MD} &= n \quad (\text{cho quá trình hấp thụ}); \\ \chi_{ED} &= n(n^2+2)^2/9; & \chi_{MD} &= n^3 \quad (\text{cho quá trình phát xạ}). \end{aligned}$$

Bên cạnh lực dao động từ  $f_{cal}$  và hệ số phát xạ ngẫu nhiên  $A_{(R)}$ , lý thuyết JO còn đưa ra khái niệm lực vạch chuyển dời (transition line strength) được định nghĩa bởi:

$$S_{ed} = e^2 \sum_{\lambda=2,4,6} \Omega_{\lambda} \langle \psi J \| U^{\lambda} \| \psi' J' \rangle^2 \quad (3.6)$$

và

$$S_{md} = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi^2 m^2 c^2} | \langle \psi J | L + 2S | \psi' J' \rangle |^2, \quad (3.7)$$

trong đó  $S_{ed}$  và  $S_{md}$  là lực vạch dipole điện và từ tương ứng.

+ Thời gian sống của trạng thái kích thích  $\tau(\psi J)$ :  $\tau = [A_{(R)}(\psi J)]^{-1}$ .

Căn cứ vào giá trị của  $\eta$  được xác định thông qua biểu thức:  $\eta = \frac{\tau_{exp}}{\tau_{cal}}$  ta có thể

biết được trong các chuyển dời từ một trạng thái kích thích nào đó xuống tất cả các mức thấp hơn nó, có ít hay nhiều chuyển dời không phát photon (chỉ phát phonon); đại lượng này gọi là hiệu suất huỳnh quang.

Ngoài ra, các đại lượng như tỷ số phân nhánh; tiết diện bức xạ và thông số liên kết cũng được xác định thông qua lý thuyết JO:

$$\beta_R(\psi J, \psi' J') = \frac{A(\psi J, \psi' J')}{A_T(\psi J)}. \quad (3.8)$$

Dựa vào  $\beta_R$  có thể tiên đoán cường độ huỳnh quang, ngay cả những vùng có bước sóng nào đó mà máy đo không ghi nhận được:

$$\sigma(\lambda_p)(\psi J, \psi' J') = [\lambda_p^4 / 8\pi^2 \Delta\lambda_{eff}] A(\psi J, \psi' J'), \quad (3.9)$$

trong đó  $\lambda_p$  là bước sóng tại đỉnh,  $\Delta\lambda_{eff}$  là độ rộng vạch hiệu dụng của chuyển dời được tính bằng cách chia diện tích tổng cộng của dải bức xạ cho độ cao của đỉnh.

$$\delta = \frac{1 - \bar{\beta}}{\bar{\beta}} \times 100. \quad (3.10)$$

Đại lượng này đặc trưng cho sự tương tác của ion đất hiếm với các ion khác của nền xung quanh, nói cách khác đại lượng này mô tả liên kết trong vật liệu: Nếu  $\delta > 0 \rightarrow$  liên kết cộng hóa trị; nếu  $\delta < 0 \rightarrow$  liên kết ion.

## 4. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 4.1. Phổ hấp thụ và phân tích bằng

#### lý thuyết JO

##### 4.1.1. Phổ hấp thụ

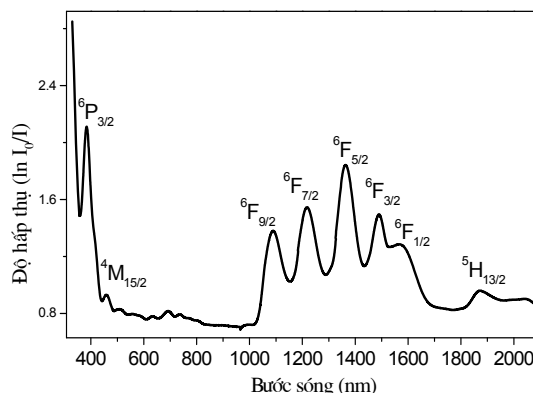
Phổ hấp thụ được ghi ở nhiệt độ phòng (Hình 1) cho thấy:  $\text{Sm}^{3+}$  trong các nền thủy tinh borate kim loại kiềm ( $67\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 12\text{Li}_2\text{O} \cdot 20\text{K}_2\text{O} \cdot 1\text{Sm}_2\text{O}_3$ ) hấp thụ ở hai vùng:

+ Dải hấp thụ trong vùng nhìn thấy (từ 350 nm đến 600 nm) có một đỉnh cường độ lớn ở vị trí 404nm, tương ứng với dịch chuyển từ trạng thái cơ bản  $^6\text{H}_{5/2}$  lên trạng thái kích thích  $^6\text{P}_{3/2}$ , một đỉnh có cường độ nhỏ ở 474nm tương ứng với dịch chuyển từ trạng thái cơ bản  $^6\text{H}_{5/2}$  lên trạng thái kích thích  $^4\text{M}_{15/2}$  [9].

+ Dải hấp thụ trong vùng hồng ngoại (từ 950 nm  $\rightarrow$  2000 nm), gồm sáu đỉnh tại các vị trí 1070nm, 1220nm, 1365nm, 1480nm, 1582nm, và 1890nm, tương ứng với dịch chuyển từ trạng thái cơ bản  $^6\text{H}_{5/2}$  lên các trạng thái kích thích  $^6\text{F}_{9/2}$ ,  $^6\text{F}_{7/2}$ ,  $^6\text{F}_{5/2}$ ,  $^6\text{F}_{3/2}$ ,  $^6\text{F}_{1/2}$  và  $^5\text{H}_{13/2}$  (các chuyển dời có cường độ mạnh xuất hiện ở 1070 nm, 1220nm, 1365nm, 1480nm, 1582nm ứng với các chuyển dời từ trạng thái  $^6\text{H}_{5/2}$  lên các trạng thái  $^6\text{F}_{9/2}$ ,  $^6\text{F}_{7/2}$ ,  $^6\text{F}_{5/2}$ ,  $^6\text{F}_{3/2}$ ,  $^6\text{F}_{1/2}$ ) [9].

##### 4.1.2. Phân tích các đại lượng vật lý bằng lý thuyết JO

Từ kết quả của phép đo chiết suất mẫu ( $n = 1.526$ ) và phổ hấp thụ ở Hình 1, ta có thể xác định được các đại lượng như lực dao động tử thực nghiệm và lý thuyết; thông số liên kết và các thông số cường độ  $\Omega_2$ ,  $\Omega_4$  và  $\Omega_6$  bằng việc sử dụng các phân tích, tính toán bằng lý thuyết JO, các kết quả được trình bày ở Bảng 1:



**Hình 1. Phổ hấp thụ của thủy tinh borate  $67\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 12\text{Li}_2\text{O} \cdot 20\text{K}_2\text{O} \cdot 1\text{Sm}_2\text{O}_3$**

**Bảng 1. Vị trí đỉnh hấp thụ của  $\text{Sm}^{3+}$ ; Lực dao động tử  $f_{\text{exp}}$  và  $f_{\text{cal}}$  của các chuyển dời hấp thụ  $\text{Sm}^{3+}$  trong thủy tinh borate kim loại kiềm ( $67\text{B}_2\text{O}_3.12\text{Li}_2\text{O}.20\text{K}_2\text{O}.1\text{Sm}_2\text{O}_3$ )**

| ${}^6\text{H}_{5/2} \rightarrow$              | $\lambda_{(\text{nm})}$ | Số sóng ( $\text{cm}^{-1}$ ) | $f_{\text{exp}} (\times 10^{-6})$ | $f_{\text{cal}} (\times 10^{-6})$ | $E_{\text{exp}}$ | $E_{\text{aqu}}$ |
|---|-------------------------|------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|------------------|------------------|
| ${}^6\text{H}_{13/2}$                         | 1890                    | 5291                         | 0.44                              | 0.28                              | 5128             | 5042             |
| ${}^6\text{F}_{1/2}$                          | 1582                    | 6321                         | 1.58                              | 1.21                              | 6578             | 6397             |
| ${}^6\text{F}_{3/2}$                          | 1480                    | 6756                         | 3.80                              | 3.79                              | 6849             | 6641             |
| ${}^6\text{F}_{5/2}$                          | 1365                    | 7326                         | 5.45                              | 4.45                              | 7299             | 7131             |
| ${}^6\text{F}_{7/2}$                          | 1220                    | 8196                         | 5.80                              | 3.74                              | 8196             | 7977             |
| ${}^6\text{F}_{9/2}$                          | 1070                    | 9345                         | 4.10                              | 2.79                              | 9345             | 9136             |
| ${}^4\text{M}_{15/2}$                         | 474                     | 21097                        | 2.10                              | 0.55                              | 21739            | 20627            |
| ${}^6\text{P}_{3/2}$                          | 404                     | 24752                        | 4.00                              | 2.85                              | 25000            | 24999            |
| <b>rms = <math>1.23 \times 10^{-6}</math></b> |                         |                              |                                   |                                   |                  |                  |

Sử dụng các công thức (3.8) và (3.10) ta xác định được các giá trị  $\bar{\beta} = 1.013$ ;  $\delta = -1.27$ . Giá trị của  $\delta < 0$  (mang giá trị âm) chứng tỏ liên kết RE – O là liên kết ion [6, 9, 10].

Mặt khác, các giá trị lực dao động tử thực nghiệm  $f_{\text{exp}}$  của chuyển dời từ  ${}^6\text{H}_{5/2}$  đến  ${}^6\text{F}_{9/2}$ ,  ${}^6\text{F}_{7/2}$ ,  ${}^6\text{F}_{5/2}$ ,  ${}^6\text{F}_{3/2}$ ,  ${}^6\text{F}_{1/2}$  và  ${}^6\text{P}_{3/2}$  có giá trị lớn hơn khá nhiều so với các chuyển dời còn lại và điều đó thể hiện cường độ chuyển dời lớn trong phổ ghi được. Bằng cách so sánh lực dao động tử thực nghiệm với lý thuyết và giải hệ phương trình (3.3) ta thu được giá trị các thông số cường độ:  $\Omega_2 = 1.02 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ;  $\Omega_4 = 4.20 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ;  $\Omega_6 = 5.17 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ . Giá trị của  $\Omega_2$  nhỏ so với các nền khác có thể liên quan tới tính bất đối xứng nhỏ và liên kết giữa RE và O<sup>-</sup> là liên kết ion nên có độ phân cực nhỏ [6,9,10].

## 4.2. Phổ huỳnh quang và đặc trưng chuyển dời bức xạ

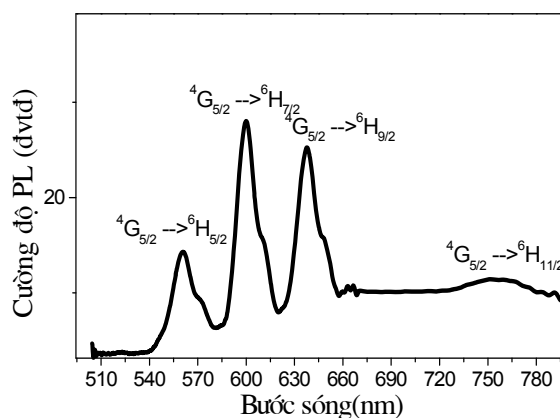
### 4.2.1. Phổ huỳnh quang

Phổ huỳnh quang đo được với dải bước sóng từ 500nm đến 800nm của  $\text{Sm}^{3+}$  trong nền thủy tinh borate kim loại kiềm

( $67\text{B}_2\text{O}_3.12\text{Li}_2\text{O}.20\text{K}_2\text{O}.1\text{Sm}_2\text{O}_3$ )

ghi ở nhiệt độ phòng, mẫu được kích thích bằng ánh sáng có bước sóng 400nm, kết quả cho ở Hình 2.

Có bốn dải bức xạ quan sát được



**Hình 2. Phổ PL của  $\text{Sm}^{3+}$  trong nền thủy tinh borate kim loại kiềm ( $\lambda_{\text{ex}} = 400\text{nm}$ )**

ở các vị trí 560nm, 600nm 650nm và 710nm tương ứng với các dịch chuyển từ mức kích thích cao  $^4G_{5/2}$  về các mức  $^6H_{5/2}$ ,  $^6H_{7/2}$ ,  $^6H_{9/2}$ ,  $^6H_{11/2}$  [3, 4, 9]. Phân tích phổ cho thấy: hai dải có cường độ lớn nhưng độ rộng vạch phổ hẹp ở 600nm và 650nm, hai dải ở 560nm và 710nm đều có cường độ bé nhưng là các dải rộng. Độ bán rộng lấy ở  $\frac{1}{2}$  cường độ có giá trị  $370\text{ cm}^{-1}$  ứng với dịch chuyển  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$  và từ  $290\text{ cm}^{-1}$  cho dịch chuyển  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{9/2}$  [9].

Mặt khác từ phổ huỳnh quang ta cũng thấy tất cả bốn dải đều có sự chồng chập lẫn nhau của hai cực đại (dạng đều giống nhau). Theo lý giải của các tác giả trong [3, 9] thì đó là sự tách mức của các chuyển dời cho phép của dipole điện.

#### 4.2.2. Các đặc trưng chuyển dời bức xạ

Trên cơ sở phổ huỳnh quang ở Hình 2, bằng cách sử dụng các công thức từ (3.5) đến (3.10) ta có thể xác định được các đặc trưng chuyển dời bức xạ (các thông số huỳnh quang) tương ứng với các chuyển dời có cường độ lớn (ứng với lực dao động tứ lớn từ  $^4G_{5/2}$  đến  $^6H_{5/2}$ ,  $^6H_{7/2}$ ,  $^6H_{9/2}$ ,  $^6H_{11/2}$ ) của ion  $\text{Sm}^{3+}$  trong nền thủy tinh borate kim loại kiềm. Các kết quả cho ở Bảng 2:

**Bảng 2. Các đặc trưng chuyển dời bức xạ: Tỷ số phân nhánh (cường độ huỳnh quang tương đối) tính toán:  $\beta_{\text{cal}}$  và thực nghiệm  $\beta_{\text{exp}}$ ; thời gian sống; tiết diện bức xạ tính toán theo JO.**

| $^4G_{5/2} \rightarrow$ | $\lambda_p$ (nm) | $S_{\text{ed}} \times 10^{-20}/e^2$ | E chuyển dời ( $\times 10^{-3}$ ) | $A_{\text{ed}} (\text{s}^{-1})$    | $\beta_{\text{cal}} (\%)$ | $\beta_{\text{exp}} (\%)$ | $\sigma(\lambda_p)(\text{cm}^{-2})$ |
|-------------------------|------------------|-------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|---------------------------|---------------------------|-------------------------------------|
| $^6F_{11/2}$            | -                | -                                   | 68.5                              | 0.369                              | 0.133                     | -                         | -                                   |
| $^6F_{9/2}$             | -                | -                                   | 83.5                              | 0.919                              | 0.331                     | -                         | -                                   |
| $^6F_{7/2}$             | -                | -                                   | 96.4                              | 2.79                               | 1.01                      | -                         | -                                   |
| $^6F_{5/2}$             | -                | -                                   | 1.05                              | 6.84                               | 2.47                      | -                         | -                                   |
| $^6F_{3/2}$             | -                | -                                   | 1.10                              | 0.787                              | 0.284                     | -                         | -                                   |
| $^6F_{1/2}$             | -                | -                                   | 1.11                              | 0.538                              | 0.194                     | -                         | -                                   |
| $^6H_{15/2}$            | -                | -                                   | 1.12                              | 0.547                              | 0.197                     | -                         | -                                   |
| $^6H_{13/2}$            | -                | -                                   | 1.26                              | 7.70                               | 2.78                      | -                         | -                                   |
| $^6H_{11/2}$            | -                | -                                   | 1.40                              | 34.9                               | 12.60                     | -                         | -                                   |
| $^6H_{9/2}$             | 650              | 6.57                                | 1.55                              | 70.6                               | 25.50                     | 31.10                     | 0.465                               |
| $^6H_{7/2}$             | 600              | 9.79                                | 1.67                              | 145.0                              | 52.40                     | 49.30                     | 0.600                               |
| $^6H_{5/2}$             | 560              | 5.72                                | 1.78                              | 6.04                               | 2.18                      | 19.6                      | 0.26                                |
|                         |                  |                                     |                                   | $A_T = 277, \tau = 3.61\text{ ms}$ |                           |                           |                                     |

Phân tích bảng số liệu ta thấy: tỷ số phân nhánh  $\beta_R$  cũng như tiết diện phát xạ  $\sigma$  cho giá trị lớn nhất ứng với chuyển dời  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$ , tiếp theo là  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{9/2}$ ;  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{5/2}$ .

Như vậy chuyển dời đáng lưu tâm nhất ở đây là  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$  có  $\beta_R$  và  $\sigma$  lớn, điều đó rất có ý nghĩa khi sử dụng vật liệu cho chế tạo laser [9].

Thời gian sống theo tính toán được là khá dài ( $\tau = 3.61$  ms), dài hơn thời gian sống thực nghiệm mà một số tác giả khác đã công bố [9]. Điều đó có thể giải thích như sau: khi tính thời gian sống theo lý thuyết Judd-Ofelt chúng ta hoàn toàn không xét đến vai trò của các chuyển dời không bức xạ, nhưng ngược lại ở các kết quả thực nghiệm luôn luôn hiện diện vai trò các chuyển dời không bức xạ, chính các chuyển dời này đã rút ngắn thời gian sống của mức kích thích  $^4G_{5/2}$  [9].

## 5. KẾT LUẬN

Vật liệu thủy tinh borate kim loại kiềm với các thành phần:  $67H_3BO_3.12Li_2O_3.20K_2CO_3.1Sm_2O_3$  là vật liệu quang học có độ trong suốt cao, điểm nóng chảy thấp. Nguyên tố đóng vai trò tâm phát quang  $Sm^{3+}$  phát các vạch bức xạ hẹp chủ yếu trong vùng nhìn thấy (560nm, 600nm và 650nm). Vì vậy, đây là một trong số các vật liệu thủy tinh pha tạp RE có thể sử dụng trong sản xuất các thiết bị chiếu sáng vùng nhìn thấy.

Phân tích phổ hấp thụ bằng lý thuyết JO, ta thu được giá trị các thông số cường độ:  $\Omega_2 = 1.02 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ;  $\Omega_4 = 4.20 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ;  $\Omega_6 = 5.17 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ . Thông số  $\Omega_2$  mô tả tính bất đối xứng của cấu trúc phối vị, độ phân cực của trường ligand và tính chất liên kết giữa ion  $Sm^{3+}$  với các ion khác ( $O^-$ ;  $Li...$ ). Vì giá trị của  $\Omega_2$  tính được nhỏ hơn so với trường hợp  $Sm^{3+}$  khi nằm trong trường thủy tinh khác [9]. Điều này có thể liên quan tới tính bất đối xứng nhỏ và liên kết giữa RE và  $O^-$  là liên kết ion (có độ phân cực nhỏ).

Phổ huỳnh quang có bốn dải tại các vị trí 560nm, 600nm 650nm và 710nm tương ứng với các dịch chuyển từ trạng thái kích thích  $^4G_{5/2}$  xuống  $^6H_{5/2}$ ,  $^6H_{7/2}$ ,  $^6H_{9/2}$ ,  $^6H_{11/2}$ . Phân tích bằng lý thuyết JO cho ta tỷ số phân nhánh  $\beta_R$  cũng như tiết diện phát xạ  $\sigma$  cho giá trị lớn nhất ứng với chuyển dời  $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_{7/2}$ , đây là chuyển dời có triển vọng để sử dụng vật liệu trong chế tạo laser.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Agarwal A., Seth V. P., Sanghi S., Gahlot P. and Khasa S. (2004), *Mixed alkali effect in optical properties of lithium-potassium bismuth borate glass system*, Materials Letters, Vol. 58, Issue 5, pp. 694-698.
- [2] Pegg B.D. (2005), *Effect of mixed transition-metal ions in glasses. Part III: The  $P_2O_5-V_2O_5-MnO$  system*, J. Non-Cryst. Solids, Vol. 351, pp. 2100-2108.
- [3] Görller C., Walrand and Binnemans K., *Spectral intensities of  $f-f$  transition*, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. Vol.25, pp. 101 – 252.
- [4] Carnall W.T., Fields P.R., and Rajnak K. (1968), *Electronic Energy Levels in the Trivalent Lanthanide Aquo Ions. I.  $Pr^{3+}$ ,  $Nd^{3+}$ ,  $Pm^{3+}$ ,  $Sm^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ ,  $Er^{3+}$ , and  $Tm^{3+}$* , J. Chem. Phys., Vol. 49, No 10, pp. 4424-4442.

- [5] Carnall W.T., Fields P.R., and Rajnak K. (1968), *Electronic Energy Levels of the Trivalent Lanthanide Aquo Ions. III. Tb<sup>3+</sup>*, J. Chem. Phys., Vol. 49, No 10, pp. 4447-4449.
- [6] Fang Y. Z., Hu L. L., Wen L., Liao M.S. (2007), *Judd–Ofelt intensity parameters of Er<sup>3+</sup> doped mixed alkali aluminophosphate glasses*, J. Alloys and Compounds 431, pp. 246-249.
- [7] Imre Á. W., Sergiy V., Divinski, Stephan V., Frank B. and Helmut M. (2006), *A revised view on the mixed-alkali effect in alkali borate glasses*, Journal of Non-Crystalline Solids, Vol. 352, Issue 8, pp. 783-788.
- [8] Judd B. R. (1962), *Optical absorption intensities of Rare-Earth ion*, Phys. Rev. Vol. 127, No 3, 750-761.
- [9] Ratnakaram Y.C., Thirupathi N.D., (2006), *Spectral studies of Sm<sup>3+</sup> and Dy<sup>3+</sup> doped lithium cesium mixed alkali borate glasses*, Journal of Non-Crystalline Solids, Vol. 352, Issue 8, pp. 3914-3922.
- [10] Zhmurin P.N. (2007), *Application of the Judd-Ofelt theory to Pr<sup>3+</sup> ions in Y<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub> crystals*, Functional materials, Vol. 14, No. 1, pp. 15-18.

## AN ANALYSIS ON TRANSITIONS ABSORPTION AND EMISSION OF Sm<sup>3+</sup> ION IN ALLKALI BORATE GLASS (67H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> . 12Li<sub>2</sub>O<sub>3</sub> .20K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> .1Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) USING THESE JUDD-OFELT

**Tran Ngoc**

Quang Binh University

**Abstract.** Optical absorption and emission spectra of Sm<sup>3+</sup> ions in allkali borate glass (67H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>.12Li<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.20K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) have been investigated. The absorption spectra of Sm<sup>3+</sup> ion in allkali borate glass shows two regions: high – energy region (at 400nm; 474nm) and low - energy region (at 1070nm, 1220nm, 1365nm, 1480nm, 1582nm, and 1890nm). The luminescence spectra indicates four emission bands at 560nm, 600nm 650nm and 710nm that were observed due to the transitions from the level <sup>4</sup>G<sub>5/2</sub> to <sup>6</sup>H<sub>5/2</sub>, <sup>6</sup>H<sub>7/2</sub>, <sup>6</sup>H<sub>9/2</sub> and <sup>6</sup>H<sub>11/2</sub> equivalently. The analyzed results by using Judd-Ofelt theory give the values of three  $\Omega_2$ ;  $\Omega_4$  and  $\Omega_6$  intensity parameters. Various radiative parameters such as transitions of probabilities ( $A_R$ ), calculated branching ratios ( $\beta_R$ ), radiative lifetime ( $\tau_R$ ) and stimulated emission crooss-sections ( $\sigma_p$ ) have been calculated for excited level.

**Keywords:** allkali borate glass