

- [1] Поуп М., Свенберг Ч. Электронные процессы в органических кристаллах. В 2-х т. М., 1985. Т. 1. 544 с.
- [2] Borcyskovski von C., Kirski T. // J. Lumin. 1987. V. 38. P. 295-299.
- [3] Jortner J., Rice S.A., Katz J.L., Choi S.I. // J. Chem. Phys. 1965. V. 42. N 1. P. 309-324.
- [4] Tiberghien A., Delacote G., Schott M. // J. Chem. Phys. 1973. V. 59. N 7. P. 3762-3769.
- [5] Петренко А.Н., Счастнев П.В. // ЖСХ. 1982. Т. 23. № 1. С. 22-28.
- [6] Петренко А.Н. // ЖПС. 1991. Т. 55. № 2. С. 196-206.
- [7] Dupuy F., Pee Ph., Lalanne R. et al. // Mol. Phys. 1978. V. 35. N 2. P. 595-599.
- [8] Port H., Rund D., Wolf H.C. // Chem. Phys. 1981. V. 60. N 1. P. 81-98.
- [9] Trotter J. // Can. J. Chem. 1961. V. 39. N 8. P. 1574-1578.
- [10] Halac E.B., Burgos E.M., Bonadeo H., D'Alessio E.A. // Acta Cryst. 1977. V. A33. P. 86-89.
- [11] Hochstrasser R.M., Zewail A.H. // Chem. Phys. 1974. V. 4. N 1. P. 142-150.
- [12] Dlott D.D., Fayer M.D. // Chem. Phys. Lett. 1976. V. 41. N 2. P. 305-310.
- [13] Ермолаев В.Л., Бодунов Е.Н., Свешникова Е.Б., Шахвердов Т.А. Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения. Л., 1977. 311 с.

Хмельницкий государственный  
технологический институт

Поступило в Редакцию  
4 января 1994 г.

УДК 537.635

© Физика твердого тела, том 36, № 6, 1994  
Solid State Physics, vol. 36, N 6, 1994

## СВЕРХТОНКОЕ И КВАДРУПОЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНА $\text{Na}^+$ С ДЫРОЧНЫМ ЦЕНТРОМ В $\text{CaF}_2:\text{Na}$

*Ц.А.Гавашели, Д.М.Дараселия, Р.И.Миррианашвили, Т.И.Санадзе*

Недавно методом ЭПР и импульсным методом дискретного насыщения [1] нами был исследован дырочный центр в монокристаллах  $\text{CaF}_2:\text{Na}$ , образованный  $\gamma$ -облучением при низких температурах [2]. В этой работе была установлена модель  $V_{KA}$ -центра и впервые обнаружена ромбичность спектра ЭПР. Было показано, что  $\gamma$ -облучение образца при температурах ниже 170 К приводит к образованию пары  $V_{KA}-F_A$ -центров около ионов Na. При нагревании образца выше 170 К  $F_A$ -центр мигрирует и остается молекулярный ион  $\text{F}_2^-$  около иона Na ( $V_{KA}$ -центр).

В настоящей работе приводятся более подробно результаты исследования сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий иона натрия с  $V_{KA}$ -центром, выполненные импульсным методом радиочастотного дискретного насыщения (РЧДН) [3]. Эксперимент проводился на оригинальном спектрометре РЧДН 3-см диапазона при температурах жидкого гелия. Для определения констант ядерного спин-гамильтониана натрия исследовалась угловая зависимость спектра РЧДН при вращении магнитного поля в плоскости (001) кристалла  $\text{CaF}_2$  и спектра РЧДН в ориентации  $\langle 001 \rangle$ .

Спин-гамильтониан системы  $\text{Na}-V_{KA}$ -центр имеет вид

$$\mathcal{H} = \beta S \hat{g} \mathbf{H} + S \hat{T} (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2) + S \hat{B} (\mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_4) + \mathcal{H}_n, \quad (1)$$

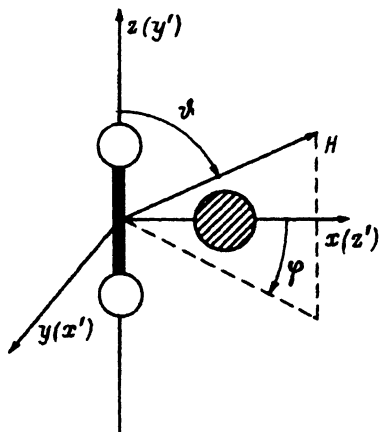


Рис. 1. Модель  $V_{KA}$ -центра натрия в кристалле  $\text{CaF}_2$ .

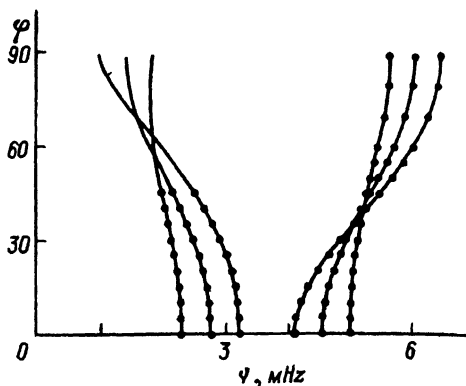


Рис. 2. Угловая зависимость в плоскости  $XOZ$  спектра РЧДН иона натрия в окружении  $V_{KA}$ -центра в  $\text{CaF}_2$ . Сплошная линия — теория, точки — эксперимент.

где  $S$  — оператор спина неспаренного электрона ( $S = 1/2$ );  $I_1$  и  $I_2$  — операторы ядерных спинов фтора молекулы  $\text{F}_2^-$ ;  $I_3$  и  $I_4$  — операторы ядерных спинов ближайших ядер фтора вдоль оси  $z$  молекулы (рис. 1);  $\hat{T}$  и  $\hat{B}$  — тензоры сверхтонкого взаимодействия соответствующих ядер фтора;  $H_n$  — гамильтониан ядра натрия, взаимодействующего с  $V_{KA}$ -центром.

Спектры РЧДН ионов натрия (рис. 2) снимались на  $R_3$ -линии спектра ЭПР, соответствующей полному ядерному спину  $I_1 + I_2 = 0$  [4], которая характеризуется малой анизотропией. Поэтому, пренебрегая малыми коэффициентами второго порядка, ядерный гамильтониан натрия можно записать в виде

$$H_n = -h\gamma HI + S\hat{A}I + Q [3I_z^2 - I(I+1) + (\eta/2)(I_+^2 + I_-^2)], \quad (2)$$

где  $\gamma$  и  $I$  — гиромагнитное отношение и оператор ядерного спина натрия ( $I = 3/2$ ),  $\hat{A}$  — тензор сверхтонкого взаимодействия ядра натрия,  $Q$  и  $\eta$  — параметры квадрупольного взаимодействия.

Спин-гамильтониан (2) записан в системе координат  $x'y'z'$  (рис. 1), в которой ось  $z'$  проходит через ион Na.

Для вычисления угловой зависимости спектра РЧДН гамильтониан (2) с помощью эйлеровских углов  $\vartheta, \varphi$  поворачивался к системе координат, в которой ось  $z$  совпадала с направлением магнитного поля, а затем проводилась его компьютерная диагонализация. Параметры, входящие в (2); варьировались с целью минимизации выражения

$$D = \sum (\nu_{\text{теор}} - \nu_{\text{exp}})^2,$$

где сумма охватывает все экспериментальные точки. Мы получили следующие параметры (MHz) спин-гамильтониана (2):

$$A_{z'z'} = 1.790 \pm 0.007, \quad A_{x'x'} = 4.723 \pm 0.016, \quad A_{y'y'} = 4.10 \pm 0.03,$$

$$Q = 0.077 \pm 0.001, \quad \eta = -0.883 \pm 0.004.$$

При этом дисперсия в плоскости (001) составляла 2 кГц. Согласие теории с экспериментом иллюстрирует рис. 2.

Более естественным является использование системы координат  $xyz$  (рис. 1), в которой ось  $z$  совпадает с осью молекулы  $F_2^-$ . Если квадрупольный член в (2) записать в эквивалентной форме

$$P_x I_x^2 + P_y I_y^2 + P_z I_z^2,$$

то легко получить для параметров спин-гамильтониана

$$P_x = -0.145, \quad P_y = -0.009, \quad P_z = 0.154 \text{ МГц}$$

при соответствующей перестановке индексов компонент тензоров сверхтонкого взаимодействия.

Работа была выполнена при поддержке Международного фонда Дж. Сороса и Американского физического общества.

#### Список литературы

- [1] Санадзе Т.И., Хуцишвили Г.Р. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 9. С. 753–761.
- [2] Гавашели Ц.А., Мирианшвили Р.И., Ромелашвили О.В., Санадзе Т.И. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 2. С. 672–675.
- [3] Khutsishvili G.R., Sanadze T.I. // 18th ampere congress. Nottingham, 1974. P. 17–22.
- [4] Merzke R.F., Miehler R.L. // Phys. Rev. 1969. V. 182. N 2. P. 453–458.

Тбилисский государственный  
университет им.И.Джавахишвили

Поступило в Редакцию  
5 января 1994 г.