

УДК 537.1

©1995

ОБОБЩЕННЫЙ ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН ЦЕНТРОВ С МНОГОЯМНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

A.B. Ройчин

Институт физики полупроводников АН Украины, Киев

(Поступила в Редакцию 31 мая 1994 г.)

Получен эффективный гамильтониан для центров с многоямным потенциалом, полностью учитывающий пространственную симметрию, симметрию по отношению к инверсии времени и эрмитовость исходных операторов энергии взаимодействия. Проведено сопоставление с существующими подходами. Рассмотрен физический смысл содержащихся в гамильтониане дополнительных параметров теории, проведены их оценки и указано на возможность их проявления.

1. В физике твердого тела интенсивно исследуются дефекты, отличающиеся наличием нескольких энергетически эквивалентных равновесных местоположений в кристалле [1–3]. Классическими примерами таких дефектов, часто называемых паразелектрическими центрами (ПЭЦ), являются примесные ионы L_i^+ и OH^- в щелочно-галоидных кристаллах. В первом случае равновесные положения смешены из узла решетки вдоль симметричных направлений, во втором — дипольно ориентированы вдоль них. Число равновесных положений n конечно: вдоль осей типа [100] их 6, вдоль [110] — 12, вдоль [111] — 8 и т. д. Из-за перекрытия потенциальных ям и волновых функций движущейся в них частицы происходит межъямное туннельное движение последней и расщепление n -кратно вырожденного терма. Возникающая при этом характерная система энергетических уровней приводит к разнообразным явлениям, в частности к паразелектрическому резонансу (ПЭР). Многие особенности этих явлений удовлетворительно объясняются существующими приближенными теориями [1,2]. Последние базируются на конкретных модельных представлениях как о структуре исследуемых систем, так и о происходящих в них процессах. В силу этого они не всегда учитывают все возможные механизмы взаимодействия и связанные с ними эффекты.

В данной работе, обобщающей существующие подходы, рассмотрены свойства упомянутых систем с единой, более общей точки зрения. С этой целью построен и проанализирован гамильтониан, учитывающий все слагаемые, допускаемые пространственной симметрией, симметрией по отношению к инверсии времени и эрмитовостью исходных операторов. Особый упор сделан на выяснение физического смысла

дополнительно возникающих слагаемых гамильтониана и рассмотрение связанных с ними новых эффектов. В разделе 2 изложен общий подход к задаче, в разделе 3 дано его конкретное применение, в разделе 4 рассмотрен физический смысл параметров гамильтониана и проведено его сопоставление с существующими подходами, в разделе 5 рассмотрены эффекты, обусловленные дополнительными параметрами теории, в разделе 6 дана оценка последних и проведено общее обсуждение результатов.

2. Пусть локальная симметрия местоположения замещаемого атома (иона) идеальной решетки будет G , а число эквивалентных смещений (поворотов) нецентрального иона (дипольной молекулы) вдоль симметрических направлений — n . Определяемое ими приводимое представление Π_n разлагается на конечное число l неприводимых представлений (НП) точечной группы G ,¹ так что

$$\Pi_n = \sum_{i=1}^l a_i \quad (1)$$

и $n = \sum_{i=1}^l r_{a_i}$, где r_{a_i} — размерность НП a_i . Если группа включает центр инверсии, в сумме (1), вообще говоря, будут содержаться НП разной частоты. Базисными функциями НП являются линейные комбинации функций представления Π_n , полученные в результате фактического разложения приводимого представления на неприводимые [4].

Исходный гамильтониан, зависящий от координат движущихся в потенциальных ямах частиц, представим в виде

$$\mathbf{W} = \sum_t \mathbf{W}_t, \quad (2)$$

где каждое слагаемое в (2) характеризует определенный механизм взаимодействия ПЭЦ с окружением. Так, пусть $\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, \mathbf{W}_3, \mathbf{W}_4$ — операторы энергии взаимодействия ПЭЦ соответственно с внутрикристаллическим электрическим полем, с внешними электрическими полями, с внешними магнитными полями и деформациями.

Следуя методу матрицы возмущения [5], представим каждое \mathbf{W}_t в виде суммы произведений, один из сомножителей в которых \hat{V}_k^c зависит от координат движущихся частиц и представляет собой k -й компонент базиса, реализующего определенное НП c . Используя трансформационные свойства волновых функций произвольных двух НП a и b и компонент V_k^c , можно написать для произвольного матричного элемента (МЭ)

$$V_{ikj}^{acb} = \int (\psi_i^a)^* V_k^c \psi_j^b d\tau = \frac{1}{N} \sum_{i'k'j'} V_{i'k'j'}^{acb} \sum_{g \in G} (G_{i'i}^a)^* G_{k'k}^c G_{j'j}^b, \quad (3)$$

¹ Здесь и далее индекс G , характеризующий определенную группу, для удобства опускаем.

где G_{em}^d — МЭ операторов группы, определяющие трансформационные свойства

$$\mathbf{G}\psi_m^d = \sum_l G_{lm}^d \psi_l^d, \quad \mathbf{G}\mathbf{V}_k^s \mathbf{G}^{-1} = \sum_{k'} G_{k'k}^s V_{k'}^s,$$

N — общее число элементов группы, $d\tau$ — элемент объема. Суммирование по g в (3) осуществляется по всем элементам группы.

Формула (3) представляет собой исходные соотношения, связывающие между собой искомые МЭ эффективного гамильтониана и устанавливающие, какие из МЭ равны нулю. Общее число уравнений (3) равно общему числу МЭ, но не все из них независимы. Часть независимых уравнений позволяет выразить одни МЭ через другие и, таким образом, сократить число МЭ, подлежащих вычислению или используемых в качестве параметров теории. К уравнению (3) следует добавить соотношение [6]

$$\int (\psi_i^a)^* \mathbf{V}_k^c \psi_j^b d\tau = \left[\int (\theta \psi_i^a)^* \theta \mathbf{V}_k^c \theta^{-1} \theta \psi_j^b d\tau \right]^*,$$

вытекающее из симметрии по отношению к оператору инверсии времени θ . И, наконец, для диагональной матрицы n -ярмного потенциала, размерности $n \times n$ следует наложить условие эрмитовости. Полученная таким образом матрица M_n эффективного гамильтониана будет содержать все возможные параметры, характеризующие учитываемые виды взаимодействия с ПЭЦ.

3. В качестве конкретной иллюстрации метода и получаемых с его помощью новых результатов рассмотрим наиболее часто встречающуюся ситуацию: локальную симметрию O_h и смещения вдоль направлений (ориентацию диполей), поникающих симметрию до групп C_{4v} , C_{3v} и C_{2v} . Соответственно возникает 6, 8 и 12 эквивалентных квазиравновесных положений, между которыми осуществляется туннелирование. Для них в соответствии с (1) имеем²

$$\begin{aligned} \Pi_6 &= A_{1g} + E_g + T_{1u}, & \Pi_8 &= A_{1g} + A_{2u} + T_{1u} + T_{2g}, \\ \Pi_{12} &= A_{1g} + E_g + T_{2g} + T_{2u} + T_{1u}. \end{aligned} \tag{4}$$

Исходный оператор (2) для определенности выберем в виде $\mathbf{W} = \sum_{t=1}^3 \mathbf{W}_t$. Оператор энергии \mathbf{W}_1 преобразуется по тождественному НП; \mathbf{W}_2 имеет вид $-\mathbf{dE}$, где \mathbf{d} — эффективный электрический дипольный момент ПЭЦ, преобразующийся по НП T_{1u} , \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля, \mathbf{W}_3 имеет вид $-\mu\mathbf{H}$, где μ — эффективный магнитный момент ПЭЦ (НП T_{1g}), вызванный, например, орбитальным движением туннелирующей частицы [7], \mathbf{H} — вектор напряженности магнитного поля.

² Обозначения НП общепринятые (например, [2]).

Перебирая из (4) различные пары НП, на основании (3) можно получить явные выражения для матриц $M_{6,8,12}$. Так, для M_6 имеем

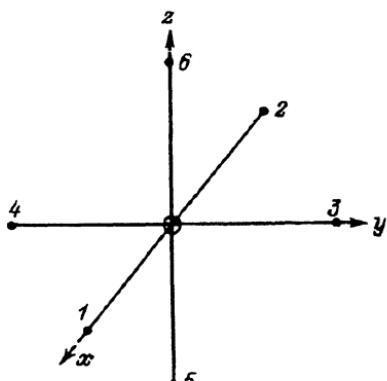
	A_{1g}	E_g		T_{1u}		
$M_6 =$	A_{1g}	λ_1	0	0	$P_1/\sqrt{2}$	iE_{1z}
	E_g	0	λ_3	0	$-\sqrt{2}P_2/4$	iE_{2z}
		0	0	λ_3	$-\sqrt{6}P_2^*/4$	$-\sqrt{6}P_2/4$
	T_{1u}	$P_1^*/\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}P_2^*/4$	$-\sqrt{6}P_2/4$	$\lambda_2 - H_{0z}$	$T/\sqrt{2}$
		$-iE_{1z}$	$-iE_{2z}$	0	$T^*/\sqrt{2}$	λ_2
		$P_1/\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}P_2/4$	$-\sqrt{6}P_2^*/4$	0	$T^*/\sqrt{2}$
						$\lambda_2 - H_{0z}$

где

$$\begin{aligned}
 P_i &= \alpha_i(E_y + iE_x), & T &= \beta(H_x + iH_y), & E_{iz} &= \alpha_i E_z, & H_{0z} &= \beta H_z, \\
 \lambda_1 &= (W_1)_{A_{1g}, A_{1g}}, & \lambda_2 &= (W_1)_{T_{1u}^{(2)}, T_{1u}^{(2)}}, & \lambda_3 &= (W_1)_{E_g^{(1)}, E_g^{(1)}}, \\
 i\alpha_1 &= -(d_z)_{A_{1g}, T_{1u}^{(2)}}, & i\alpha_2 &= -(d_z)_{E_g^{(1)}, T_{1u}^{(2)}}, & \beta &= -(\mu_z)_{T_{1u}^{(3)}, T_{1u}^{(3)}}. \quad (6)
 \end{aligned}$$

Верхний индекс у обозначения НП означает порядковый номер функции данного НП. Более громоздкие матрицы M_8 и M_{12} для простоты не высчитываем. Из (5) видно, что в общем случае существуют три параметра λ , характеризующие внутрикристаллическое электрическое поле, два параметра α , характеризующие влияние внешних электрических полей, и один параметр β , описывающий влияние внешних магнитных полей. Аналогично для матриц M_8 и M_{12} число параметров λ , α и β соответственно равно 4, 3 и 2 (для $n = 8$); 5, 5 и 5 (для $n = 12$).

4. При описании различных свойств ПЭЦ можно пользоваться обобщенными эффективными гамильтонианами (ОЭГ) типа (5), в которых параметры α_i , β_i , λ_k и т. д. следует рассматривать в качестве независимых параметров теории. Выясним их физический смысл и проведем сопоставление полученных результатов с данными других подходов. С этой целью воспользуемся так называемым явным приближением, являющимся аналогом метода МО ЛКАО в квантовой химии [8]. Пусть



Равновесные положения нецентрального иона (направления диполей) и выбор системы координат.

Светлый кружок — положение иона в идеальном кристалле, темные кружки — смещенные положения равновесия. Оси координат направлены вдоль кристаллографических осей типа [100].

φ_i — ямная функция частицы в i -ом квазиравновесном положении (см. рисунок). Тогда для ортонормированных симметризованных волновых функций, определяющих в (5) МЭ α, β, λ , имеем

$$\begin{aligned}\psi_{A_{1g}} &= (6\sigma_1)^{-1/2} \sum_{i=1}^6 \varphi_i, \quad \sigma_1 = 1 + 4S_1 + S_2, \\ \psi_{E_g}^{(1)} &= (12\sigma_2)^{-1/2} \left[\sum_{i=1}^4 \varphi_i - 2(\varphi_5 + \varphi_6) \right], \quad \sigma_2 = 1 - 2S_1 + S_2, \\ \psi_{T_{1u}}^{(2)} &= (2\sigma_3)^{-1/2} (\varphi_5 - \varphi_6), \quad \sigma_3 = 1 - S_2, \\ \psi_{T_{1u}}^{(3)} &= (4\sigma_3)^{-1/2} [\varphi_1 - \varphi_2 + i(\varphi_3 - \varphi_4)],\end{aligned}\tag{7}$$

где $S_1 = \int \varphi_1 \varphi_3 d\tau$, $S_2 = \int \varphi_1 \varphi_2 d\tau$ — интегралы неортогональности.

Подстановка (7) в (6) дает

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{W_{11} + 4W_{13} + W_{12}}{\sigma_1}, \quad i\alpha_1 = (d + 4d_{15})(3\sigma_1\sigma_3)^{-1/2}, \\ \lambda_2 &= \frac{W_{11} - W_{12}}{\sigma_3}, \quad i\alpha_2 = (-d + 2d_{15})(3\sigma_2\sigma_3)^{-1/2} \cdot \sqrt{2}, \\ \lambda_3 &= \frac{W_{11} - 2W_{13} + W_{12}}{\sigma_2}, \quad \beta = \frac{2i\mu_{13}}{\sigma_3},\end{aligned}\tag{8}$$

где

$$\begin{aligned}W_{ij} &= \int \varphi_i W_1 \varphi_j d\tau, \quad d_{ij} = - \int \varphi_i dz \varphi_j d\tau, \\ d &= d_{55}, \quad \mu_{13} = - \int \varphi_1 \mu_z \varphi_3 d\tau.\end{aligned}$$

Если пренебречь всеми недиагональными МЭ, получим

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \lambda_2 = \lambda_3 = W_{11}, \quad i\alpha_1 = \frac{d}{\sqrt{3}}, \quad i\alpha_2 = -\frac{\sqrt{2}d}{\sqrt{3}}, \quad \beta = 0, \\ \alpha_2 &= -\sqrt{2}\alpha_1.\end{aligned}\tag{9}$$

В этом случае при $E = 0$ расщепление уровней не происходит и система описывается всего одним параметром d — локальным электрическим дипольным моментом. Такое приближение используется, когда рассматриваются большие внешние электрические поля (по сравнению с внутристекловскими).

Чаще всего используется так называемое туннельное приближение, в котором все недиагональные МЭ считаются малыми, при этом следующие МЭ предполагаются равными нулю: $W_{12}, S_2, d_{15}, \mu_{13}$. Кроме того, равным нулю полагается и произведение $S_1 W_{11}$, которое, вообще говоря, того же порядка величины, что и W_{13} . Таким образом, влияние внешнего электрического поля описывается лишь моментом d , а

магнитные эффекты не учитываются. В результате для этого случая в дополнение к (9) приближенно можно записать

$$\lambda_1 = W_{11} + 4k, \quad \lambda_2 = W_{11}, \quad \lambda_3 = W_{11} - 2k, \quad k = W_{13}, \quad \lambda_{12} = 2\lambda_{23}. \quad (10)$$

Здесь и далее $\lambda_{ij} = \lambda_i - \lambda_j$.

5. Рассмотрим эффекты, обусловленные дополнительными параметрами теории, в частности отклонением от формул типа (9), (10) и соотношения $\beta = 0$. С этой целью найдем на основе матрицы (5) и соответствующего ей секулярного уравнения энергетические уровни ε_i , определяющие свойства ПЭШ. Поскольку нахождение точных аналитических выражений для ε_i представляется невозможным, рассмотрим приближенные решения задачи при различных взаимных соотношениях между операторами W_t .

a) Слабое Е-поле. В этом случае предполагается, что оператор W_2 можно рассматривать в качестве возмущения к оператору W_1 . В предельном случае $E = 0$ расстояние между уровнями λ_{12} и λ_{23} можно определить непосредственно с помощью бесполевого ПЭР. Если окажется, что соотношение (10) не выполняется, актуальными будут следующие дополнительные слагаемые к λ_i :

$$\Delta\lambda_1 = k', \quad \Delta\lambda_2 = -k', \quad k' = W_{12} - W_{11}S_2,$$

так что

$$k = \frac{\lambda_{13}}{6}, \quad k' = \frac{\lambda_{12} - 2\lambda_{23}}{6}.$$

При $E \neq 0$ энергетическая структура для некоторых симметричных направлений E с точностью до членов $\sim E_i^4$ приведена в табл. 1. В ней в столбцах 1 приведены формулы с учетом всех параметров, в столбцах 2 — в тунNELном приближении, где одинаковый сдвиг всех уровней W_{11} для удобства положен равным нулю; ν — число различных уровней. Несущественное для целей статьи соответствие между уровнями в пределах НП для разных ориентаций E специально не устанавливалось.

b) Сильное Е-поле. В этом случае оператор W_2 рассматривается в качестве нулевого приближения, а оператор W_1 — в качестве возмущения. Выражения для энергии с точностью до членов, квадратичных по λ_i , приведены в табл. 2. В ней смысл обозначений и содержание столбцов 1 и 2 те же, что и в табл. 1; кроме того, $l_1 = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}$, $l_2 = \sqrt{4\alpha_1^2 + \alpha_2^2}$.

c) Учет параметра β . Рассмотрим оператор W_3 в качестве возмущения к оператору W_1 . В этом случае при произвольной ориентации внешнего магнитного поля H последнее вызовет расщепление трехкратно вырожденного терма на три магнитных подуровня: 0 и $\pm\beta H$.

6. Переходя к обсуждению результатов, прежде всего отметим, что из сопоставления столбцов 1 и 2 в таблицах видно, что энергетическая структура в общем случае существенно отличается от получающейся в тунNELном приближении. В частности, в последнем случае при некоторых ориентациях E возникает «случайное» вырождение уровней, снимаемое при учете дополнительных параметров. Соответственно будут отличия и в ряде эффектов. Так, в спектрах ПЭР возможно появление дополнительных линий, изменение их формы и т. д.

Таблица 1

Энергетическая структура ПЭП в случае слабых полей*

		E					
		$E_x = E_y = 0$		$E_z = E$		$E_x = E_y = E/\sqrt{2}$, $E_z = 0$	
ε_i	1	2	1	2	1	2	1
A_g	ε_1	$\lambda_1 + \frac{E_1^2}{\lambda_{12}}$	$4k + \frac{\bar{E}^2}{12k}$	$\lambda_1 + \frac{E_1^2}{\lambda_{12}}$	$4k + \frac{\bar{E}^2}{12k}$	$\lambda_1 + \frac{E_1^2}{\lambda_{12}}$	$4k + \frac{\bar{E}^2}{12k}$
	ε_2	λ_3	$-2k$	$\lambda_3 + \frac{3E_2^2}{4\lambda_{32}}$	$-2k - \frac{\bar{E}^2}{4k}$	$\lambda_3 + \frac{E_2^2}{2\lambda_{32}}$	$-2k - \frac{\bar{E}^2}{6k}$
E_g	ε_3	$\lambda_3 + \frac{E_2^2}{\lambda_{32}}$	$-2k - \frac{\bar{E}^2}{3k}$	$\lambda_3 + \frac{E_2^2}{4\lambda_{32}}$	$-2k - \frac{\bar{E}^2}{12k}$	$\lambda_3 + \frac{E_2^2}{2\lambda_{32}}$	$-2k - \frac{\bar{E}^2}{6k}$
	T_{1u}	ε_4	λ_2	0	λ_2	0	$\lambda_2 + \frac{E_1^2}{\lambda_{21}}$
T_{1g}	ε_5	λ_2	0	$\lambda_2 + \frac{3E_2^2}{4\lambda_{23}}$	$\frac{\bar{E}^2}{4k}$	$\lambda_2 + \frac{E_2^2}{2\lambda_{23}}$	$-\frac{\bar{E}^2}{12k}$
	ε_6	$\lambda_6 + \frac{E_1^2}{\lambda_{21}} + \frac{E_2^2}{\lambda_{23}}$	$\frac{\bar{E}^2}{4k}$	$\lambda_2 + \frac{E_1^2}{\lambda_{21}} + \frac{E_2^2}{4\lambda_{23}}$	0	$\lambda_2 + \frac{E_2^2}{2\lambda_{23}}$	$\frac{\bar{E}^2}{6k}$
	ν		5	5	6	5	4

* $E_i = \alpha_i E$, $\bar{E} = dE$.

Таблица 2

Энергетическая структура ПЭП в случае сильных полей

ε_i	E			
	$E_x = E_y = 0, E_z = E$		$E_x = E_y = E/\sqrt{2}, E_z = 0$	
	1	2	1	2
ε_1	λ_3	$-2k$	λ_2	0
ε_2	λ_2	0	$\lambda_2 + \frac{4\alpha_1^2\lambda_{32} + \alpha_2^2\lambda_{31}}{l_2^2}$	0
ε_3	λ_2	0	$\frac{\lambda_2 + \lambda_3}{2} + \frac{\sqrt{3}E_2}{2}$	$-k + \frac{\bar{E}}{\sqrt{2}}$
ε_4	$\lambda_2 + \frac{\alpha_1^2\lambda_{32} + \alpha_2^2\lambda_{12}}{l_1^2}$	$2k$	$\frac{\lambda_2 + \lambda_3}{2} - \frac{\sqrt{3}E_2}{2}$	$-k - \frac{\bar{E}}{\sqrt{2}}$
ε_5	$\lambda_2 + El_1 + \frac{\alpha_1^2\lambda_{12} + \alpha_2^2\lambda_{32}}{2l_1^2}$	\bar{E}	$\lambda_2 + \frac{1}{2}El_2 + \frac{4\lambda_{12}\alpha_1^2 + \lambda_{32}\alpha_2^2}{2l_2^2}$	$k + \frac{\bar{E}}{\sqrt{2}}$
ε_6	$\lambda_2 - El_1 + \frac{\alpha_1^2\lambda_{12} + \alpha_2^2\lambda_{32}}{2l_1^2}$	$-\bar{E}$	$\lambda_2 - \frac{1}{2}El_2 + \frac{4\lambda_{12}\alpha_1^2 + \lambda_{32}\alpha_2^2}{2l_2^2}$	$k - \frac{\bar{E}}{\sqrt{2}}$
ν	5	5	6	5

Возникающее под действием магнитного поля расщепление может проявиться по-разному. Во-первых, возможны прямые переходы между магнитными подуровнями, так как магнитодипольные переходы разрешены. При этом, если расстояние между подуровнями значительно меньше частот ПЭР, для увеличения чувствительности можно осуществить двойной резонанс с подсветкой на частоте ПЭР, аналогичной двойному электронно-ядерному резонансу [9]. Во-вторых, при осуществлении ПЭР в присутствии постоянного H -поля можно наблюдать расщепление линий, пропорциональное полю H , аналогичное эффекту Зеемана в оптике.

Оценим величину дополнительных параметров. В этой целью выберем в качестве ямной осцилляторную функцию вида

$$\varphi_i = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \left| r - R^{(i)} \right|^2 \right), \quad (11)$$

где m — масса тунNELирующего иона, ω — частота колебаний в одной из потенциальных ям, \hbar — постоянная Планка, $R^{(i)}$ — координата i -го положения равновесия ($R = R_x^{(1)} = R_y^{(3)} = R_z^{(6)} = \dots$ и.д.). Непосредственный расчет по формулам (8) дает $\alpha_1/\alpha_2 = -(1 + 3t/2)/\sqrt{2}$, где параметр $t = \exp(-m\omega R^2/\hbar)$ характеризует отклонение от формулы (9) и указывает на наличие двух независимых параметров. Полагая [10-12] $R = 0.35 \cdot 10^{-8}$ см, $\omega = 7.5 \cdot 10^{12}$ rad/s, $m = 10^{-23}$, получим $t = 0.42$, поэтому проявление эффектов, обусловленных существованием двух независимых параметров α_1 и α_2 , представляется реальным.

Используя явное выражение для оператора момента количества движения и (11), аналогично можно рассчитать параметр β . Оценки показывают, что он порядка ядерного магнетона. Поэтому переходы между магнитными полувороньями находятся в области радиочастотного диапазона, соответствующего ядерному магнитному резонансу.

В туннельном приближении расстояние между уровнями в отсутствие внешних полей и деформаций определяется соотношением (10) в случае шестиямного потенциала, либо эквидистантно в случаях восьмиямного. Однако, как показывают некоторые эксперименты [2,13], туннельное приближение выполняется не всегда, поэтому дополнительные параметры теории, характеризующие влияние и внутрикристаллического электрического поля W_1 , могут быть значительны. В связи с этим в ряде работ (например, [13]) указывалось на возможность использования и других подходов, выходящих за рамки туннельного приближения, а проведенный нами [14,15] анализ экспериментальных данных $S_1O_2 : Al^{3+}$ показал необходимость учета дополнительных параметров и в низкосимметричных туннельных системах.

В заключение отметим, что рассмотренный в работе ОЭГ для ПЭЦ является электрическим аналогом обобщенного спинового гамильтониана, описывающего парамагнитные центры. В отличие от обычного (приближенного) спинового гамильтониана последний содержит ряд дополнительных параметров (слагаемых), многие из которых уже проявились в экспериментах в виде новых эффектов. Наиболее значительными из них являются так называемые эффекты низкой симметрии [16], позволившие резко увеличить возможности применения парамагнитного резонанса. Поэтому и на основании всего вышесказанного можно заключить, что выявление и изучение эффектов, связанных с дополнительными параметрами ОЭГ дадут новую информацию о ПЭЦ, приведут к совершенствованию соответствующих экспериментальных методик, в частности ПЭР, и расширению их применения.

Данная работа в значительной степени стимулирована обсуждением с И.Н.Гейфманом и И.С.Головиной их экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке Комитета по науке и технологиям при кабинете министров Украины.

Список литературы

- [1] Глинчук М.Д., Грачев В.Г., Дейген М.Ф., Ройцин А.Б., Суслин Л.А. Электрические эффекты в радиоспектроскопии. М. (1981), 336 с.
- [2] Копвиллем У.Х., Сабурова Р.В. Параэлектрический резонанс. М. (1982), 224 с.
- [3] Вихнин В.С. // Радиоспектроскопия твердого тела / Под ред. Ройцина А.Б. Киев (1992), С. 258–287.
- [4] Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике. М. (1957), 354 с.
- [5] Ройцин А.Б. Некоторые применения теории симметрии в задачах радиоспектроскопии. Киев (1973), 100 с.
- [6] Вигнер Е. Теория групп. М. (1961), 443 с.
- [7] Ройцин А.Б. ЖЭТФ **64**, 3, 989 (1973).
- [8] Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л. (1986), 288 с.
- [9] Грачев В.Г., Дейген М.Ф. УФН **125**, 4, 631 (1978).
- [10] Narayanamurti V., Pohl R.O. Rev. Mod. Phys. **42**, 2, 201 (1970).
- [11] Quigley R., Das T.D. Phys. Rev. **164**, 3, 1185 (1967).
- [12] Nolt I.G., Sievers A.J. Phys. Rev. Lett. **16**, 24, 1103 (1966).
- [13] Estle T.L. Phys. Rev. **176**, 3, 1056 (1968).
- [14] Ройцин А.Б., Брик А.Б., Ищенко С.С., Матяш И.В., Литовченко А.С. ФТТ **26**, 10, 2968 (1984).
- [15] Ройцин А.Б., Брик А.Б., Гохман В.Л. ЖЭТФ **94**, 5, 194 (1988).
- [16] Roitsin A.B. Phys. Stat. Sol. (b) **104**, 1, 11 (1981).