

Об анизотропной сверхтонкой структуре спектров ЭПР примесных ионов в монокристаллах

© О.С. Торосян, С.М. Яйлоян, Ф.С. Торосян*, Л.М. Мхоян*

Институт прикладных проблем физики Академии наук Армении,
375014 Ереван, Армения

*Армянский государственный инженерный университет,
377502 Гюмри, Армения

E-mail: Khoren@iapp.sci.am

(Поступила в Редакцию 11 сентября 1998 г.)

Получены выражения для сверхтонких расщеплений в спектрах ЭПР примесных ионов с электронным спином 1/2 и произвольным ядерным спином при произвольной анизотропии g -фактора и константы сверхтонкой структуры. Эти результаты являются обобщением ранее полученных результатов Вейла [1] для случая слабой анизотропии g -фактора и константы сверхтонкой структуры.

Известно, что значения параметров спектров ЭПР со сверхтонкой структурой (СТС) определяются либо численно, либо методами теории возмущений. При этом точные значения этих параметров определяются расчетом на ЭВМ путем полной диагонализации матрицы для соответствующего спин-гамильтониана с опорными значениями, найденными при приближенном расчете. Поэтому для анализа спектров ЭПР с СТС важное значение имеют приближенные аналитические выражения для резонансных магнитных полей линий СТС и сверхтонких расщеплений, представляющих собой расстояние (по магнитному полю) между положениями этих линий.

В данном сообщении получены некоторые полезные соотношения для резонансных магнитных полей и сверхтонких расщеплений в спектрах ЭПР, описываемых спин-гамильтонианом вида

$$H_S = \beta(g_x H_x S_x + g_y H_y S_y + g_z H_z S_z) + A_x S_x I_x + A_y S_y I_y + A_z S_z I_z. \quad (1)$$

Здесь $S = 1/2$, I — произвольное, а все остальные обозначения общепринятые. Отметим, что спектры ЭПР многих примесных редкоземельных ионов в кристаллах описываются спин-гамильтонианом (1) с сильно анизотропными g -фактором и константой СТС. В случае слабой анизотропии g -фактора и константы СТС для расстояния по магнитному полю между сверхтонкими линиями с одинаковым $|m|$ (m — ядерное магнитное квантовое число) Вейлом было получено очень простое соотношение [1]. При этом спин-гамильтониан (1) представлялся в виде суммы изотропной и анизотропной частей и применялась теория возмущений первого порядка, анизотропная часть рассматривалась как возмущение. Этот результат, как очень интересный и полезный, вошел в монографию [2] и был подробно анализирован. Однако этот результат имеет ограниченное применение, так как корректен при слабой анизотропии g -фактора и константы СТС.

В данном сообщении обобщены результаты Вейла на случай произвольной анизотропии g -фактора и константы СТС с помощью теории возмущений третьего порядка

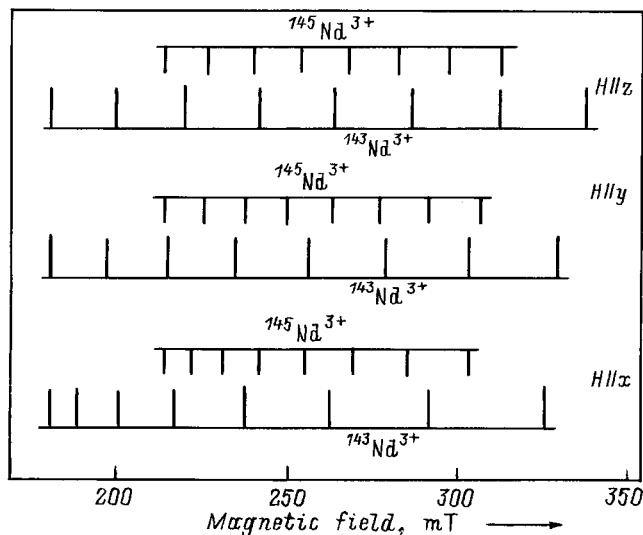
в гамильтониане (1), причем магнитное сверхтонкое взаимодействие рассматривалось как возмущение к зеемановской энергии.

Применение теории возмущений третьего порядка обусловлено тем, что вклады в разделение линий $m \leftrightarrow m$ и $-m \leftrightarrow -m$ переходов, возникающих от второго и третьего порядков сверхтонких поправок, сравнимы по величине и поэтому должны быть учтены одновременно. Действительно, сдвиги второго порядка резонансных линий пропорциональны m^2 и поэтому имеют одинаковый знак для $m \leftrightarrow m$ и $-m \leftrightarrow -m$ переходов, но слегка отличаются по величине из-за различия резонансных магнитных полей для $m \leftrightarrow m$ и $-m \leftrightarrow -m$ переходов, полученных в первом порядке. Поэтому изменение расстояния между m и $-m$ линиями, обусловленное сдвигами второго порядка, будет отличаться от этих сдвигов множителем, равным отношению энергии сверхтонкого взаимодействия к зеемановской энергии. Следовательно, изменение расстояния между m и $-m$ линиями, полученное во втором порядке теории возмущений, является фактически эффектом третьего порядка. С другой стороны, сдвиги линий $m \leftrightarrow m$ и $-m \leftrightarrow -m$ переходов, рассчитанные в третьем порядке, содержат линейные и кубические члены по m и поэтому будут иметь противоположные знаки. Следовательно, изменение расстояния между m и $-m$ линиями, полученное в третьем порядке, и их соответствующие сдвиги будут одного порядка, т. е. эффектом третьего порядка.

Считая, что магнитное поле направлено вдоль оси z и вычисляя энергетические уровни гамильтониана (1) до третьего порядка теории возмущений для резонансных магнитных полей для $\Delta m = 0$ переходов, будем иметь

$$H_m = \frac{h\nu}{g_z \beta} - \frac{A_z m}{g_z \beta} \left[1 + \frac{A_x^2 + A_y^2}{2(2h\nu)^2} \right] - \frac{A_x^2 + A_y^2}{4g_z \beta h\nu} [I(I+1) - m^2], \quad (2)$$

где ν — микроволновая частота измерения спектров ЭПР. Из уравнения (2) можно получить следующее



Теоретически рассчитанные положения линий СТС ионов Nd^{3+} в монокристаллах PbCl_2 .

простое соотношение:

$$\frac{H_{-m} - H_m}{2m} = \frac{A_z}{g_z \beta} \left[1 + \frac{A_x^2 + A_y^2}{2(2h\nu)^2} \right]. \quad (3)$$

Из (2) также можно получить

$$H_{m-1} - H_m = \frac{A_z}{g_z \beta} \left[1 + \frac{A_x^2 + A_y^2}{2(2h\nu)^2} \right] - \frac{A_x^2 + A_y^2}{2g_z \beta h\nu} (m - 1/2). \quad (4)$$

Соотношение (3) в случае слабой анизотропии константы СТС совпадает с результатом Вейла (уравнение (14) [2]). Уравнения (2)–(4) могут быть использованы и при $\mathbf{H} \parallel x$ и $\mathbf{H} \parallel y$, если произвести в них перестановки $z \rightarrow x \rightarrow y \rightarrow z$ и $z \rightarrow y \rightarrow x \rightarrow z$ соответственно.

На рисунке приведены положения сверхтонких линий $\Delta m = 0$ для ионов Nd^{3+} ($S = 1/2$, $I = 7/2$) в монокристаллах PbCl_2 , полученные с помощью точной диагонализации на ЭВМ спин-гамильтониана (1), с использованием значений g -факторов и констант СТС, измеренных в [3]. Для иллюстрации целесообразности полученных соотношений (2)–(4) эти же значения магнитных полей для приведенных на рисунке линий были рассчитаны и с помощью уравнений (2)–(4). Расхождение этих результатов настолько незначительно, что его нельзя отметить на рисунке. Отметим, что линии, приведенные на рисунке, при $\mathbf{H} \parallel x$ и $\mathbf{H} \parallel y$ параллельно сдвинуты таким образом (оставляя при этом их относительное расположение неизменным), чтобы их начала совпадали с началом линий в случае $\mathbf{H} \parallel z$.

Список литературы

- [1] J.A. Weil. J. Magn. Reson. **4**, 394 (1971).
- [2] М.Л. Мейльман, М.И. Самойлевич. Введение в спектроскопию ЭПР активированных монокристаллов. Атомиздат, М. (1977). С. 93.
- [3] A.G. Badalyan, P.G. Baranov, V.A. Chramtsov, C. Barta, J. Rosa. Solid State Commun. **58**, 877 (1986).