

УСЛОВИЯ СИММЕТРИЧНОСТИ ЗЕЕМАНОВСКИХ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ИОНОВ Fe^{3+} В АНДАЛУЗИТЕ

В. П. ШАХПАРЯН, Р. М. МАРТИРОСЯН

Получены аналитические выражения для энергетических уровней ионов Fe^{3+} I и II типов в андалузите. Из этих выражений получены условия симметричности этих уровней для обоих типов ионов Fe^{3+} . Построены графические зависимости частот сигнала и накачки от напряженности магнитного поля для ионов I типа при $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$, и для ионов II типа при $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$.

Известно, что в кристаллической решетке андалузита имеются две группы неэквивалентных магнитных ионов Fe^{3+} , которые по классификации Бильдюкевича и др. [1] названы ионами I и II типов. Эти ионы имеют один и тот же вид спин-гамильтониана, но обладают различными значениями постоянных внутрикристаллического поля [2]. Последнее обстоятельство приводит к тому, что спектры обоих типов ионов отличаются друг от друга.

В работах [3, 4] сообщалось об успешном применении андалузита с примесью ионов Fe^{3+} (ионов II типа по вышеуказанной классификации) в качестве активного вещества в квантовых парамагнитных усилителях (КПУ). В силу достаточно больших начальных расщеплений и сравнительно небольшого значения диэлектрической постоянной применение андалузита с обоими типами ионов в КПУ миллиметрового диапазона представляет большой интерес.

Известно [5, 6], что при симметричном расположении энергетических уровней парамагнитного иона использование двухтактной схемы накачки приводит к увеличению относительной инверсии по сравнению с простой трехуровневой системой.

Исследования показывают, что применение андалузита в КПУ миллиметрового диапазона возможно, в основном, в двухтактном режиме накачки, так как при трехуровневой схеме накачки частота накачки резко возрастает (> 150 Гц). Исходя из вышеуказанных фактов, в данной работе получены аналитические выражения для симметричного расположения энергетических уровней ионов I и II типов в андалузите. Получены также зависимости частот сигнала и накачки от напряженности магнитного поля для ионов I типа при $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$ и II типа при $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$.

При эффективном спине $S = \frac{5}{2}$ точный расчет ориентации, необходимой для двухтактной схемы накачки, весьма затруднителен. Поэтому более удобным будет рассмотрение задачи в рамках теории возмущений.

Спиновый гамильтониан ионов Fe^{3+} в андалузите имеет следующий вид [2]:

$$\hat{H} = D \left[\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + E (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) + g\beta H \hat{S} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (1)$$

где g — фактор спектроскопического расщепления,
 β — магнетон Бора,
 H — вектор напряженности магнитного поля,
 \hat{S} — спиновый оператор.

Если известны собственные значения \hat{H}_0 , определяющие расщепления в нулевом магнитном поле, и соответствующие собственные кет-состояния, то \hat{H}_1 можно преобразовать к системе, в которой \hat{H}_0 имеет диагональную форму.

Этот метод более подробно описан в работе [7] и удобен тем, что вместо одного уравнения шестой степени он дает три квадратных секулярных уравнения, причем допускается, что каждый уровень энергии двукратно вырожден при $H=0$.

Квадратные уравнения легко решаются и дают линейную зависимость расщеплений дублетных уровней от углов θ, φ ориентации постоянного магнитного поля [7]. Нужно условие $\varphi(\theta)$ равенства расщеплений каких-либо энергетических уровней можно теперь получить, приравняв друг другу любые два решения квадратных секулярных уравнений. Эти условия необходимые, но недостаточные, поскольку уравнения точны лишь в пределе $H \rightarrow 0$. Ошибка нахождения энергии уровней этим методом по порядку величины равна $(g\beta H)^2$, деленной на расщепление в нулевом поле.

Чтобы решить поставленную задачу вышеуказанным методом, надо рассчитать энергетические расщепления уровней в нулевом поле и разложить смешанные состояния в нулевом поле по чистым спиновым состояниям.

Волновые функции ионов Fe^{3+} с эффективным спином $S = \frac{5}{2}$, находящихся во внутрикристаллическом поле андалузита с спин-гамильтонианом (1), можно представить в следующем виде [8]:

$$\psi_i^\pm = a_i |S_z = \pm \frac{5}{2}\rangle + b_i |S_z = \pm \frac{1}{2}\rangle + c_i |S_z = \mp \frac{3}{2}\rangle, \quad (2)$$

где индекс $i = 1, 2, 3$ относится к трем дублетам, а коэффициенты разложения удовлетворяют условиям нормировки

$$|a_i|^2 + |b_i|^2 + |c_i|^2 = 1. \quad (3)$$

Используя волновые функции (2), с помощью теории возмущений можно найти собственные значения энергии для двукратно вырожденных состояний. Для этого надо решить систему квадратных секулярных уравнений

$$|\hat{H}_{nn'} - W_{nn'}| = 0, \quad (4)$$

где $\hat{H}_{nn'}$ — матричные элементы оператора возмущения $g\beta H\hat{S}$ для волновых функций ψ_{\pm}^{\pm} .

Решая эту систему уравнений, для ветвей дублетов получаем следующее аналитическое выражение:

$$W_i^{\pm} = \pm 2,8H \left\{ \frac{(5a_i^2 + b_i^2 - 3c_i^2)^2}{4} \cos^2\theta + \sin^2\theta \left[\left(a_i c_i \sqrt{5} + \frac{3}{2} b_i^2 \right)^2 + 8b_i^2 c_i^2 + 2b_i c_i \sqrt{2} (2a_i c_i \sqrt{5} + 3b_i^2) \cos 2\varphi \right] \right\}^{1/2}. \quad (5)$$

Как видно из (5), для нахождения зависимости собственных значений энергии W_i^{\pm} от H , θ и φ надо знать волновые функции соответствующих состояний, т. е. коэффициенты a_i , b_i и c_i разложения смешанных состояний по чистым состояниям. Указанные волновые функции были найдены для двух типов ионов Fe^{3+} в андалузите. Для ионов I и II типов они соответственно есть

$$\psi_1^{\pm} = -0,056 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,9747 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,2164 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle,$$

$$\psi_2^{\pm} = -0,0195 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,2156 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,9763 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle, \quad (6)$$

$$\psi_3^{\pm} = 0,9982 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,0588 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,0069 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle,$$

$$\psi_1^{\pm} = -0,0003 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,9999 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,0013 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle,$$

$$\psi_2^{\pm} = -0,0000006 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,0013 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,9999 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle, \quad (7)$$

$$\psi_3^{\pm} = 0,9999 \left| \pm \frac{5}{3} \right\rangle + 0,0003 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,0000002 \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle.$$

Подставляя в (5) коэффициенты разложения a_i , b_i , c_i из (6) и (7), для энергий соответственно I и II типов ионов получаем

$$W_1^{\pm} = \pm 2,8 H \sqrt{0,2063 \cos^2\theta + \sin^2\theta (2,4642 - 1,715 \cos 2\varphi)},$$

$$W_2^{\pm} = \pm 2,8 H \sqrt{1,9755 \cos^2\theta + \sin^2\theta (0,3552 + 0,0323 \cos 2\varphi)}, \quad (8)$$

$$W_3^{\pm} = \pm 2,8 H \sqrt{6,2135 \cos^2\theta + \sin^2\theta (0,0002 + 0,000075 \cos 2\varphi)},$$

$$W_1^{\pm} = \pm 2,8 H \sqrt{0,2499 \cos^2\theta + \sin^2\theta (1,2491 - 0,011 \cos 2\varphi)},$$

$$W_2^{\pm} = \pm 4,2 H \cos \theta \left(= \pm \frac{3}{2} g \beta H \cos \theta \right) - \text{чистое состояние}, \quad (9)$$

$$W_3^{\pm} = \pm 7,0 H \cos \theta \left(= \pm \frac{5}{2} g \beta H \cos \theta \right) - \text{чистое состояние}.$$

Условия симметричного расщепления уровней для обоих типов ионов получаются из (8) и (9), если потребовать, чтобы

$$W_1^+ - W_1^- = W_2^+ - W_2^-, \quad (10)$$

$$W_1^+ - W_1^- = W_3^+ - W_3^-, \quad (11)$$

$$W_2^+ - W_2^- = W_3^+ - W_3^-. \quad (12)$$

Для ионов I типа получаем:

$$\text{из (10)} \quad \cos 2\varphi = 2,195 - \frac{1,009}{\sin^2\theta}, \quad (13)$$

$$\text{из (11)} \quad \cos 2\varphi = 4,9413 - \frac{3,503}{\sin^2\theta}, \quad (14)$$

$$\text{из (12)} \quad \cos 2\varphi = -142,2 + \frac{131,2}{\sin^2\theta}. \quad (15)$$

Для ионов II типа получаем

$$\text{из (10)} \quad \cos 2\varphi = 424,9 - \frac{200}{\sin^2\theta}, \quad (16)$$

$$\text{из (11)} \quad \cos 2\varphi = 824,9 - \frac{600}{\sin^2\theta}. \quad (17)$$

Из (12) следует, что симметричный режим невозможен, так как эти состояния остаются чистыми при всех ориентациях.

На рис. 1 и 2 приведены графики зависимости $\varphi(\theta)$ для обоих типов ионов Fe^{3+} в андалузите.

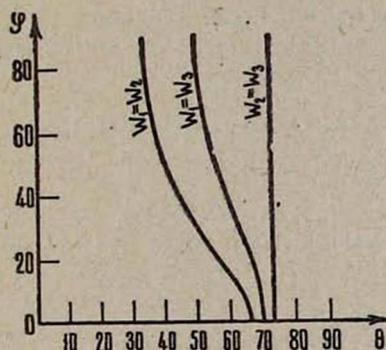


Рис. 1. Ориентация для двухтактной работы усилителя на ионах Fe^{3+} I типа в андалузите.

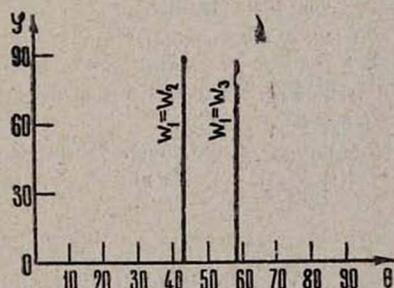


Рис. 2. Ориентация для двухтактной работы усилителя на ионах Fe^{3+} II типа в андалузите.

На основе (13) и (16) нами были найдены спектры и построены графики зависимостей частот сигнала и накачки от напряженности магнитного поля при $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$ для ионов I типа и $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$ для ионов II типа.

Как видно из рис. 3, частоты сигнала вблизи 75 Гц почти не зависят от изменения значения внешнего магнитного поля в интервале

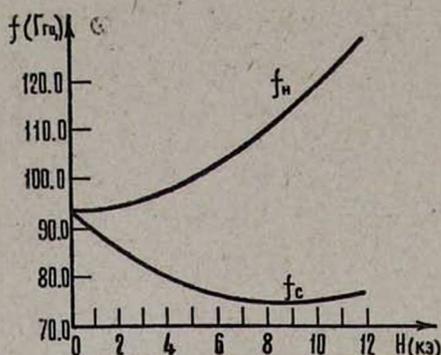


Рис. 3. Зависимость частот сигнала и накачки для ионов Fe^{3+} I типа в андалузите в одном из симметричных режимов ($\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$).

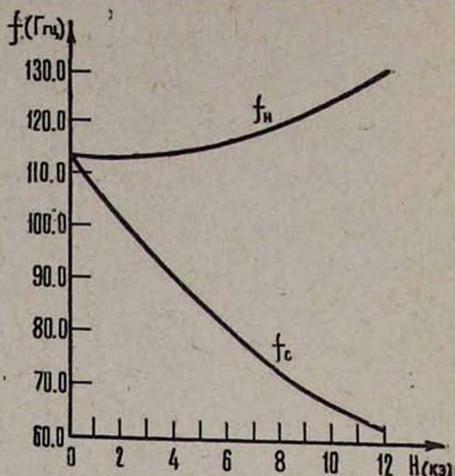


Рис. 4. Зависимость частот сигнала и накачки для ионов Fe^{3+} II типа в андалузите при симметричном режиме ($\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$).

(6,5–10,5) кэ, в то время, как соответствующие частоты накачки изменяются в пределах от 117,6 до 126,4 Ггц. Этот режим может быть с успехом применен при создании КПУ миллиметрового диапазона.

Институт радиопизики и электроники
АН АрмССР

Поступила 16.III.1973.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. А. А. Бильдюкевич и др. ЖЭТФ, 39, 1548 (1960).
2. F. Holuj, J. R. Thyer, N. E. Hedgescock. Canad. J. Phys., 44, 509 (1966).
3. 4. И. И. Еру, С. А. Песковацкий, А. Н. Чернец. Радиотехника и электроника, 13, 1045, 1049 (1968).
5. А. Симен. Мазеры, Изд. Мир, 1966.
6. Н. В. Карлов, А. А. Маненков. Квантовые усилители. Под ред. А. М. Прохорова, Институт научной информации АН СССР, Итоги науки, серия Радиофизика, 1966.
7. E. U. Condon, H. Odishaw. Handbook of Physics, pt. 2, New-York, 1958, pp. 48–51.
8. H. Hollis Wickman, Melvin P. Klein, D. A. Shirley. J. Chem. Phys., 42, 2113 (1965).

Fe^{3+} իոնների ջեեմանսան մակարդակների սիմետրիկոմթսան
ՊԱՅՄԱՆՆԵՐԸ ԱՆՌԱԼՈՒԳԻՏՈՒՄ

Վ. Պ. ՇԱԽՊԱՐՅԱՆ, Ռ. Մ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ

Ստացված են Fe^{3+} I և II տիպի իոնների էներգետիկ մակարդակների անալիտիկ արտահայտություններն անդալուզիտում, այդ մակարդակների սիմետրիկոմթսան պայմանները, ազդանշանի և մղման հաճախությունների կախվածությունն արտաքին մագնիսական դաշտից I տիպի իոնների համար՝ $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$ դեպքում, իսկ II տիպի իոնների համար՝ $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$ դեպքում,

THE SYMMETRY CONDITIONS OF THE ENERGY-LEVELS IN
TRIVALENT-IRON-DOPED ANDALUSITE

W. P. SHAKHPARIAN, R. M. MARTIROSIAN

The analytical expressions for energy-levels of Fe^{3+} I and II type ions in andalusite, the symmetry conditions for these levels, the external magnetic field dependence for the signal and pumping frequency for I type ions at $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 66^\circ 12'$ and for II type ions at $\varphi = 0^\circ$, $\theta = 43^\circ 24'$ have been obtained.