

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

СВЕРХТОНКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЗЕЕМАНОВСКИХ УРОВНЕЙ ИОНОВ  $Mo^{3+}$  В МОНОКРИСТАЛЛАХ КОРУНДА И ИТТРИЕВО-АЛЮМИНИЕВОГО ГРАНАТА

О. С. ТОРОСЯН, Э. А. МАРКОСЯН, Э. Г. ШАРОЯН

В данной работе методом ЭПР на частоте  $9,25 \text{ Гц}$  исследовалась угловая зависимость сверхтонкого расщепления зеемановских уровней  $Mo^{3+}$  в корунде ( $Al_2O_3$ ) и иттриево-алюминиевом гранате ( $Y_3Al_5O_{12}$ ). Ионы  $Mo^{3+}$  в этих кристаллах изоморфно замещают ионы  $Al^{3+}$  в октаэдрической координации. Основным состоянием ионов  $Mo^{3+}$ , обладающих электронной конфигурацией  $[k_r] 4d^3$  и находящихся в сильном кристаллическом поле, является орбитальный синглет с четырехкратным спиновым вырождением. Тригональное искажение октаэдрического поля вместе со спин-орбитальным взаимодействием расщепляют этот уровень на два крамерсовых дублета с интервалом энергии  $2D$ , который много больше по сравнению с зеемановской энергией (для обычно используемых магнитных полей в X-диапазоне) и энергией сверхтонкого взаимодействия. Величина  $2D$  для ионов  $Mo^{3+}$  в  $Al_2O_3$  и  $Y_3Al_5O_{12}$  равна соответственно  $(-49 \pm 18) \text{ Гц}$  [1] и  $(288 \pm 70) \text{ Гц}$  [2]. Вследствие такого большого расщепления крамерсовых дублетов сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР  $Mo^{3+}$  в монокристаллах корунда и иттриево-алюминиевого граната, изучаемое в слабых магнитных полях ( $g\beta H \ll |2D|$ ), оказывается анизотропным, хотя и измеренная константа сверхтонкого взаимодействия почти изотропна. Решение соответствующего спин-гамильтониана в первом порядке теории возмущений дает угловую зависимость для сверхтонкого расщепления, совпадающую с экспериментально измеренной.

Спектры ЭПР описываются аксиально-симметричным спин-гамильтонианом с осью симметрии  $z$ , совпадающей с осью тригонального искажения монокристаллов  $Al_2O_3$  и  $Y_3Al_5O_{12}$ . Если считать, что магнитное поле приложено в плоскости  $xz$  под углом  $\theta$  к оси  $z$ , то спин-гамильтониан будет иметь вид

$$H = D \{ S_z^2 - 1/3 S(S+1) \} + g_{\parallel} \beta H S_z \cos \theta + g_{\perp} \beta H S_x \sin \theta + A_{\parallel} S_z I_z + A_{\perp} (S_x I_x + S_y I_y), \quad (1)$$

где  $S = 3/2$ ,  $I = 5/2$ .

При решении уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) методом теории возмущений операторы зеемановского и сверхтонкого взаимодействий рассматриваются как возмущение к невозмущенному оператору, даваемому первым членом в (1). Учитывая также, что сверхтонкое взаимодействие много меньше зеемановского,  $|A| \ll g\beta H$ , поправки от сверхтонкого взаимодействия следует находить после диагонализации зеемановского взаимодействия. Так как невозмущенный гамильтониан имеет два двухкратно вы-

рожденных по электронному спину состояния  $S_z = \pm 1/2$  и  $S_z = \pm 3/2$  с энергиями  $-D$  и  $+D$  соответственно, поправки к этим термам в первом порядке по зеемановскому взаимодействию находятся решением соответствующих секулярных уравнений второго порядка. Тогда для двухкратно вырожденного уровня  $|\pm 1/2\rangle$  энергии в первом порядке и правильные функции нулевого приближения имеют вид

$$E_{+1/2} = -D + 1/2 g_{\parallel}^2 H, \quad |+\overline{1/2}\rangle = C_1 | +1/2\rangle + C_2 | -1/2\rangle, \quad (2)$$

$$E_{-1/2} = -D - 1/2 g_{\parallel}^2 H, \quad |-\overline{1/2}\rangle = C_1 | +1/2\rangle - C_2 | -1/2\rangle, \quad (3)$$

где

$$g = (g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + 4 g_{\perp}^2 \sin^2 \theta)^{1/2}, \quad (4)$$

$$C_1 = \left[ 1/2 \left( 1 + \frac{g_{\parallel} \cos \theta}{g} \right) \right]^{1/2}, \quad C_2 = \left[ 1/2 \left( 1 - \frac{g_{\parallel} \cos \theta}{g} \right) \right]^{1/2}.$$

Каждый из зеемановских уровней (2) и (3) шестикратно вырожден по ядерному спину. Поэтому поправки в первом порядке по сверхтонкому взаимодействию к уровням (2) и (3) находятся диагонализацией матрицы оператора сверхтонкого взаимодействия, составленной по состояниям  $|\pm 1/2\rangle |m\rangle$  и  $|\mp 1/2\rangle |m\rangle$ , где  $m = I_z = -5/2, -3/2, -1/2, +1/2, +3/2, +5/2$ . Эта матрица имеет следующий вид:

$$\begin{vmatrix} \mp 5/4 \alpha & \pm \sqrt{5} \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \pm \sqrt{5} \gamma & \mp 3/4 \alpha & \pm \sqrt{8} \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm \sqrt{8} \gamma & \mp 1/4 \alpha & \pm \sqrt{9} \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm \sqrt{9} \gamma & \pm 1/4 \alpha & \pm \sqrt{8} \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm \sqrt{8} \gamma & \pm 3/4 \alpha & \pm \sqrt{5} \gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pm \sqrt{5} \gamma & \pm 5/4 \alpha \end{vmatrix} \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{A_{\parallel} g_{\parallel} \cos \theta}{g}, \quad \gamma = \frac{A_{\perp} g_{\perp} \sin \theta}{g}.$$

Из матрицы (5) для поправок к зеемановским уровням (2) и (3) от сверхтонкого взаимодействия получаем

$$E_{(\pm 1/2, m)}^{CB} = \pm 1/2 A m, \quad A = 1/g (A_{\parallel}^2 g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + 16 A_{\perp}^2 g_{\perp}^2 \sin^2 \theta)^{1/2}. \quad (6)$$

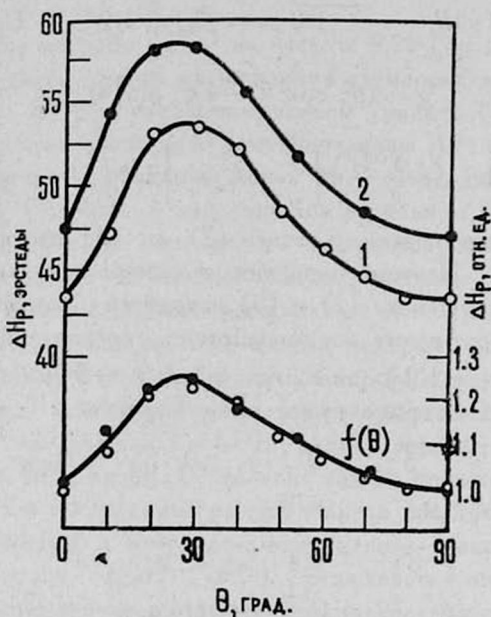
В таблице приведены измеренные нами значения  $g$ -факторов и констант сверхтонкого взаимодействия  $Mo^{3+}$  в корунде и иттриево-алюминиевом гранате.

Таблица

	$g_{\parallel}$	$g_{\perp}$	$A_{\parallel} (M\mu\mu)$	$A_{\perp} (M\mu\mu)$
$Al_2O_3$	$1,968 \pm 0,001$	$1,98 \pm 0,01$	$119 \pm 1$	$121 \pm 2$
$Y_3Al_5O_{12}$	$1,965 \pm 0,001$	$1,95 \pm 0,01$	$129 \pm 1$	$130 \pm 1$

Для угловой зависимости величины сверхтонкого расщепления  $\Delta H_p = \frac{A}{g\beta}$ , представляющего собой расстояние между соседними компонентами СТС, при  $g_{\parallel} = g_{\perp}$  и  $A_{\parallel} = A_{\perp}$  с учетом (6) и (4) в относительных единицах имеем

$$\frac{\Delta H_p(\theta)}{\Delta H_p(0)} \equiv f(\theta) = \frac{\sqrt{1 + 15 \sin^2 \theta}}{1 + 3 \sin^2 \theta}.$$



Угловые зависимости величины сверхтонкого расщепления ионов  $Mo^{3+}$  в  $Al_2O_3$  (кривая 1) и  $Y_3Al_5O_{12}$  (кривая 2).

На рисунке приведены графики зависимостей измеренных значений сверхтонкого расщепления  $\Delta H_p$  от угла  $\theta$  для корунда и граната. Эти же значения  $\Delta H_p$  в относительных единицах, как видно из того же рисунка, практически совпадают с функцией  $f(\theta)$ .

Институт физических исследований  
АН АрмССР

Поступила 13.V.1974

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. E. G. Sharoyan, O. S. Torosyan, E. A. Markosyan, V. T. Gabrielyan. Phys. Stat. sol. (b) 65, № 2 (1974).
2. Kh. S. Bagdasarov, Yu. N. Dubrov, J. N. Marov, V. O. Martirosyan, M. L. Meilman. Phys. Stat. sol. (b), 56, K65 (1973).



$Mo^{3+}$  իոնների ջեմանովային մակարդակների Գերեմոնովի ճեղքումիւ  
կորնդիւնդի եւ, իՏՏՐԻՈՒՄԻ ԱՂՅՈՒՄԻՆԱՅԻՆ ՆՈՒՆԱՔԱՐԻ ՄԻԱՔՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Հ. Ս. ԹՈՐՈՍՅԱՆ, Է. Ա. ՄԱՐԿՈՍՅԱՆ, Է. Գ. ՇԱՐՈՅԱՆ

*Ուսումնասիրված է  $Mo^{3+}$  իոնների զերմոնով ստրուկտուրայի անկյունային կախումը կո-  
րունդում և իտտրիում ալյումինային նոնաքարում:*

## HYPERFINE SPLITTING OF ZEEMAN LEVELS OF $Mo^{3+}$ IONS IN CORUNDUM AND YTTRIUM ALUMINIUM GARNET SINGLE CRYSTALS

O. S. TOROSSYAN, E. A. MARKOSSYAN, E. G. SHAROYAN

The angular dependence of the hyperfine structure of  $Mo^{3+}$  ions in corundum and yttrium aluminium garnet was investigated.