КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 538.113

ОЦЕНКА ПРЕДЕЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ КОНСТАНТ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ЭПР-СПЕКТРА, РАССЧИТЫВАЕМЫХ МЕТОДОМ ВОЗМУЩЕНИЯ

В. Н. Лазукин, А. Н. Терентьевский, В. И. Даниленко

(кафедра атомной физики)

Энергетическая структура парамагнитных элементов в кристаллических решетках в большинстве случаев удовлетворительно описывается соотношениями, полученными на основании точечной модели решетки. Согласно представлениям этой модели, орбитальное вырождение снимается кристаллическим полем соответственно симметрии решетки. Кроме того, кристаллическое поле через спин-орбитальное взаимодействие частично осуществляет снятие спинового вырождения парамагнитного иона. В самом общем виде воздействие постоянного магнитного поля и кристаллического поля на спиновую систему описывается спин-гамильтонианом (С—Г) [1]:

$$\widehat{\mathcal{H}} = (g_x\beta H_x\widehat{S}_x + g_y\beta H_y\widehat{S}_y)\sin\theta + g_z\beta H_z\widehat{S}_z\cos\theta + \sum_{n=2,4,\ldots}^{2s}\sum_{m=0,2}^{n} B_n^m\widehat{O}_n^m. \quad (1)$$

Условие применимости теории возмущений для вычисления собственных значений энергетической матрицы С—Г (1) запишется в следующем виде:

$$g\beta HM \gg \Sigma\Sigma B_n^m O_n^m. \quad (2)$$

Неравенство (2) неопределенно в том смысле, что не позволяет указать предельные величины констант $B_n{}^m$, для которых метод теории возмущений все еще можно использовать. Целью настоящей работы является получение таких оценок.

Метод теории возмущений позволяет из С—Г (1) с учетом неравенства (2) получить набор аналитических выражений [1, 2], описывающих результаты экспериментов по угловому смещению ЭПР-переходов тонкой структуры для спиновых систем с $S=1$, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2 и т. д. С помощью аналитических выражений [1, 2] в X-диапазоне частот ($h\nu=0{,}32$ см$^{-1}$) для спиновых систем $S=1$, 3/2, 2, 5/2 были определены положения резонансных переходов при трех значениях углов: 0, 45 и 90°. При этом константы $b_n{}^m$ варьировались в пределах 0—1,0 см$^{-1}$ с шагом $50\cdot10^{-4}$ см$^{-1}$. Наряду с этим решением машинным способом численно диагонализировалась матрица С—Г (1) при тех же значениях углов и для тех же значений констант $b_n{}^m$, что позволило точно определить положение в поле H соответствующих линий тонкой структуры.

Таким образом, представляется возможность найти величину расхождения между точным решением задачи о собственных значениях энергий спиновых систем и решением, полученным по теории возмуще-

ний с точностью до поправок второго порядка. Найденное расхождение в данной работе записывается в виде относительной погрешности

$$\sigma^{(2)} = \frac{|H^{(2)} - H|}{H} \cdot 100\ \%, \tag{3}$$

где $H^{(2)}$ — положение резонансных линий, полученных методом теории возмущений с точностью до поправок второго порядка; H — положение резонансных линий, полученных методом численной диагонализации матрицы С—Г (1).

Если исходить из предположения, что метод численной диагонализации позволяет получить точные решения во всем диапазоне величин констант тонкой структуры, а метод теории возмущений в этом плане ограничен соотношением (2), то сравнение полученных результатов (3) позволяет определить максимальные значения констант, при которых (с заданной погрешностью) все еще справедлива теория возмущений. В целях наглядности результаты вышеуказанного сравнения частично табулированы, частично изображены графически.

На рис. 1, 2 представлены результаты расчета относительной погрешности в определении положения резонансных линий в зависимости от величины констант тонкого расщепления D и E. Цифрами *1—12* отмечены соответствующие кривые резонансных переходов.

Относительная погрешность положения тонких переходов спиновых систем $S=2$, 5/2 для С—Г с различным набором b_4^m дана в виде таблицы.

b_4^m, 10^{-3} см$^{-1}$	$S=2$					$S=5/2$				
	$M \to M'$	$\sigma^{(2)}$, %				$M \to M'$	$\sigma^{(2)}$, %			
		1	5	10	15		1	5	10	15
b_4^0	$0 \to -1$	81	84	88	91	$-1/2 \to -3/2$	36	38	39	40
	$1 \to 0$	85	130	150	155	$3/2 \to 1/2$	43	52	68	73
	$2 \to 1$	140	205	235	250	$-1/2 \to -3/2$	37	52	60	65
b_4^2	$\pm 1 \to 0$	230	500	660	800	$\pm 3/2 \to \pm 5/2$	315	420	470	520
	$0 \to -1$	420	510	540	570	$-3/2 \to -5/2$	190	200	223	250
	$1 \to 0$	460	700	770	780	$-3/2 \to -5/2$	200	260	330	335
b_4^3		>1000	>1000	>1000	>1000	$1/2 \to -1/2$	750	>1000	>1000	>1000
	$0 \to -1$	1000	2100	2200	2300	$-1/2 \to -3/2$	600	800	900	1000
		>1000	>1000	>1000	>1000	$1/2 \to -1/2$	>1000	>1000	>1000	>1000
b_4^4	$\pm 2 \to \pm 1$	1000	>1000	>1000	>1000	$\pm 3/2 \to \pm 1/2$	450	610	700	765
	$0 \to -1$	640	1000	>1000	>1000	$-1/2 \to -3/2$	250	420	530	600
	$0 \to -1$	540	700	730	760	$-1/2 \to -3/2$	240	255	300	320

Следует отметить следующее обстоятельство. Как видно из рис. 1, 2 и таблицы, соответствующие расчетные сравнения представлены далеко не для всех тонких переходов. Оказывается, что расхождение между точным решением и решением, полученным методом теории возмущений, далеко не одинаково для различных переходов тонкой структуры. Поэтому приведены только кривые для переходов с максимальной относительной погрешностью.

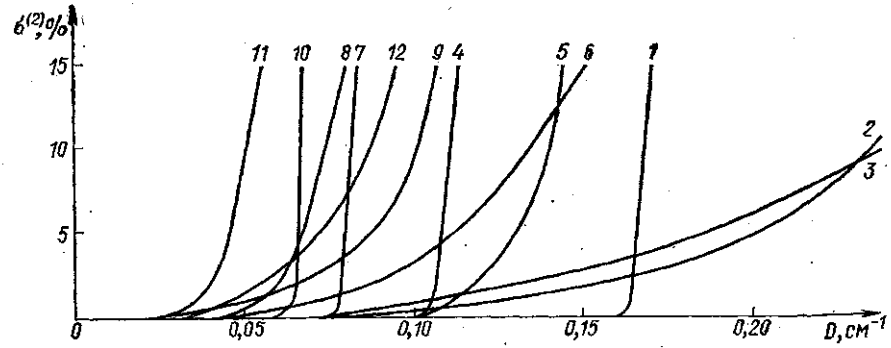

Рис. 1. Относительная погрешность положения тонкого спектра ЭПР в зависимости от величины константы D, полученная методом теории возмущений с точностью до поправок второго порядка для $S=1$ (кривая *1*: переход $1\to0$; *2*: $1\to0$; *3*: $0\to-1$), $S=3/2$ (*4*: $3/2\to1/2$; *5*: $3/2\to1/2$; *6*: $-1/2\to-3/2$), $S=2$ (*7*: $2\to1$; *8*: $2\to1$; *9*: $-1\to-2$), $S=5/2$ (*10*: $5/2\to3/2$; *11*: $5/2\to3/2$; *12*: $-1/2\to-3/2$). Переходы с максимальным значением $\sigma^{(2)}$ указаны соответственно для углов 0, 45 и 90°

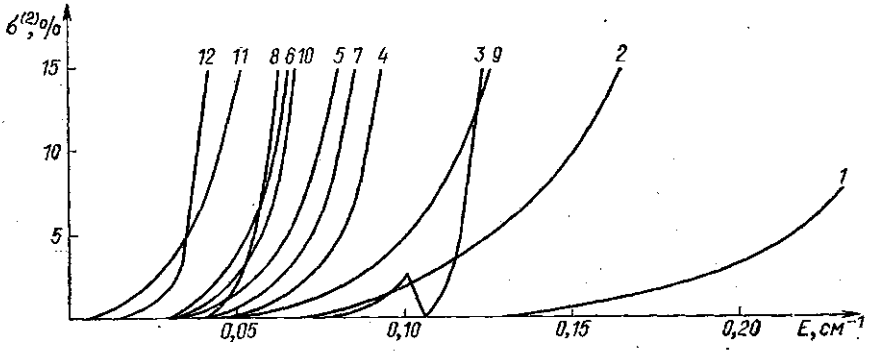

Рис. 2. Относительная погрешность положения тонкого спектра ЭПР в зависимости от величины константы E, полученная методом теории возмущений с точностью до поправок второго порядка для $S=1$ (кривая *1*: переход $\pm1\to0$; *2*: $1\to0$; *3*: $1\to0$), $S=3/2$ (*4*: $1/2\to-1/2$; *5*: $3/2\to1/2$; *6*: $3/2\to1/2$), $S=2$ (*7*: $\pm1\to0$; *8*: $2\to1$; *9*: $1\to0$), $S=5/2$ (*10*: $\pm3/2\to\pm1/2$; *11*: $3/2\to1/2$; *12*: $5/2\to3/2$). Переходы с максимальным значением $\sigma^{(2)}$ указаны соответственно для углов 0, 45 и 90°

В заключение отметим, что полученные результаты позволяют уверенно определять область корректного использования теории возмущений, обладающей тем бесспорным преимуществом, что она дает возможность аналитически описать решения энергетической матрицы С—Г (1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Терентьевский А. Н., Лазукин В. Н. Расчет ЭПР-спектров элементов группы железа в кристаллических полях (1).— Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1979, **20**, № 3, с. 31—39. [2] Терентьевский А. Н., Лазукин В. Н. Расчет ЭПР-спектров элементов группы железа в кристаллических полях (2).— Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1979, **20**, № 4, с. 38—44.

Поступила в редакцию
22.04.80