

ПАРАМЕТРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ
В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ ШЕЕЛИТА

Л.Я.Шекун

В кристаллах гомологического ряда шеелита ($CaWO_4$) редкоземельные ионы легко образуют центры с симметрией $\bar{2}_4$. Анализируя оптические спектры и данные по ЭПР этих центров, мы нашли, что действие кристаллического поля на трехзарядный редкоземельный ион можно описать потенциалом

$$V = B_2^0 V_2^0 + B_4^0 V_4^0 + B_6^0 V_6^0 + B_4^4 V_4^4 + B_6^4 V_6^4, \quad (1)$$

где $B_n^m = A_n^m \langle r^n \rangle$, а V_n^m - безразмерные гармонические полиномы. Для всех редкоземельных ионов B_2^0 должно быть положительным, а B_4^0 , B_4^4 и B_6^4 - отрицательными. Доминирующими константами являются B_4^4 и B_6^4 , причем $|B_4^4| > |B_6^4|$. Представление о порядках величины B_n^m дает набор

$$\begin{aligned} B_2^0 &= + 260 \text{ см}^{-1}, & B_4^4 &= - 800 \text{ см}^{-1}, \\ B_4^0 &= - 75 \text{ см}^{-1}, & B_6^4 &= - 380 \text{ см}^{-1}, \\ B_6^0 &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

воспроизводящий с точностью $\pm 10 \text{ см}^{-1}$ иттарковскую структуру Yb^{3+} в $CaWO_4$ [1] и с точностью $\pm 20 \text{ см}^{-1}$ структуру уровней ${}^4I_{9/2}$, ${}^4I_{11/2}$, ${}^4I_{13/2}$ Na^{3+} в $PbMoO_4$ [2]. Не меняя констант (2),

можно с точностью ~15% получить g -факторы основных дублетов Ce^{3+} [3], Nd^{3+} [4], Sm^{3+} [5], Tb^{3+} [6] и Yb^{3+} [7] в $CaWO_4$. Для больших J (${}^4I_{15/2}$ Nd^{3+} и E_2^{3+}) согласие с экспериментом хуже. Потенциал (I) можно разбить на чисто кубическую и аксиальную части:

	B_2^0	B_4^0	B_6^0	B_4^4	B_6^4
Кубич.	0	-160	+18	- 800	- 380
Аксиальн.	+ 260	+ 85	-18	0	0
Сумма	+ 260	- 75	0	- 800	- 380

Отсюда видно, что главную роль в потенциале играет кубическая часть. Этот факт можно использовать при грубых расчетах.

Подробное обоснование наших выводов, проиллюстрированное результатами вычислений для отдельных ионов, будет вскоре опубликовано.

Казанский государственный
университет

Поступило в редакцию
10 сентября 1965 г.

Литература

- [1] R. Pappalardo, D.L. Wood. J. Molec. Spectr., 10, 81, 1963.
- [2] Я.Э.Карисс, П.П.Феофилов. Оптика и спектроскопия, 17, 718, 1964.
- [3] J. Kirton, R.C. Newman. Phys. Lett., 10, 277, 1964.
- [4] Н.Е.Каск, Л.С.Корниенко, А.М. Прохоров, М.Факир, ФТТ, 5, 2303, 1963.
- [5] J. Kirton. Phys. Lett., 16, 209, 1965.
- [6] P.A. Forrester, C.F. Hampstead. Phys. Rev., 126, 923, 1962.
- [7] U. Banon, V. Volterra. Phys. Rev., 134A, 1483, 1964.