

04,08

Сверхтонкая структура спектров ЭПР нечетных изотопов Gd^{3+} в $PbMoO_4$, $Pb_5Ge_3O_{11}$, YVO_4 и квадрупольное взаимодействие (температурная зависимость)

© А.Д. Горлов

Научно-исследовательский институт физики и прикладной математики
Уральского федерального университета,
Екатеринбург, Россия

E-mail: Anatoliy.Gorlov@usu.ru

(Поступила в Редакцию 20 августа 2012 г.)

Исследована сверхтонкая структура сигналов ЭПР нечетных изотопов Gd^{3+} в монокристаллах $Pb_5Ge_3O_{11}$, $PbMoO_4$ и YVO_4 при разных температурах. Наблюдение запрещенных (с переворотом ядерного спина) переходов позволило определить квадрупольное взаимодействие P_2^0 , связанное с градиентом электрического поля лигандов на примеси. Впервые показано, что при условии $|P_2^0| \geq |A_{x,y}|$ (A_i — компоненты тензора), не только величина расщеплений, но и наблюдаемая асимметрия в сверхтонкой структуре (в перпендикулярных ориентациях внешнего магнитного поля) зависит от взаимных знаков параметров начального расщепления b_2^0 и P_2^0 . Результаты изучения спектров показали, что $|b_2^0(T)|/|P_2^0(T)| \sim \text{const}$ для конкретного монокристалла, что предполагает близость физических механизмов, определяющих эти параметры.

1. Введение

Изучение сверхтонкой структуры (СТС) сигналов ЭПР примесных центров (ПЦ) ведутся со времен открытия электронного парамагнитного резонанса. Тем не менее оказывается, что есть не до конца изученные особенности СТС в ситуации, когда величина квадрупольного взаимодействия (КВ) $|P_2^0| \geq |A_i|$ ($i = x, y$) компонент тензора собственного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) для $S > 1/2$ и $I > 1/2$. Наши исследования СТС ЭПР переходов для нечетных изотопов Gd^{3+} ($S = 7/2$ и $I = 3/2$) показали, что в этом случае можно получить информацию как о величине, так и знаках параметров КВ. В работе представлены температурные исследования спектров ЭПР (область температур $T = 1.8, 4.2, 100-400$ К) и СТС сигналов нечетных изотопов Gd^{3+} в $PbMoO_4$, $Pb_5Ge_3O_{11}$ и YVO_4 .

Дальнейшее рассмотрение будет касаться лишь этих материалов, где локальная симметрия ПЦ выше ромбической. Тогда тензор СТВ можно представить как диагональный с параметрами $A_z = A_{||}$, $A_x = A_y = A_{\perp}$, а КВ определяется одним параметром P_2^0 [1]. Заметим также, что определение P_2^0 возможно лишь при наблюдении ЭПР-переходов $M, m \leftrightarrow M'm'$ ($\Delta S_z = \Delta M \neq 0$) с изменением проекций ядерного спина (это запрещенные переходы (ЗП) с $\Delta I_z = \Delta m \neq 0$), вероятность которых W_{fi} обычно мала [1]. W_{fi} увеличиваются в перпендикулярных ориентациях внешнего магнитного поля H из-за смешивания ядерных состояний большим КВ. Однако при значениях $|P_2^0| < |A_{\perp}|$ положения ЗП таковы, что они маскируются крыльями интенсивных разрешенных переходов (РП) с $\Delta m = 0$, а при $|P_2^0| \geq |A_{\perp}|$ ЗП отнесены от центра СТС на величину $\sim 2P_2^0$, поэтому их можно наблюдать. Такие структуры описаны в [2] для Gd^{3+} в YPO_4 и Ir^{2+} в MgO , CaO на электронном

переходе $1/2 \leftrightarrow -1/2$, где относительные положения компонент СТС симметричны относительно центра и не зависят от знаков параметров спинового гамильтониана (СГ). Следует заметить, что без учета большого КВ, определяемые из СТС величины A_{\perp} , как, например в [3], всегда в 1.3–1.4 меньше реальных.

Цель работы — показать, что исследования СТС-структуры ЭПР-переходов нечетных изотопов Gd^{3+} в разных кристаллах при $|P_2^0| \geq |A_{\perp}|$ позволяют определить не только значения компонент тензора A , но и абсолютную величину P_2^0 (если знак b_2^0 известен) при разных температурах.

Изученные монокристаллы с примесью Gd^{3+} удобны для таких исследований, поскольку сигналы ЭПР узкие, выполняется условие $|P_2^0| > |A_i|$, а величины и знаки b_2^0 и P_2^0 различны. Частично результаты работы были изложены в [4–6].

2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Температурные исследования спектров ЭПР в разных ориентациях магнитного поля проведены на спектрометре Bruker EMX plus в 3-см диапазоне. Изученные кристаллы выращены методом Чохральского с примесью 0.01 весовых процентов $Gd_2^{157}O_3$ в шихте, кроме YVO_4 , где также наблюдался ЭПР спектр Gd^{3+} , как сопутствующей примеси.

Параметры b_n^m , описывающие спектры ЭПР четных изотопов Gd^{3+} при любой температуре (локальная симметрия центров $C_{3v}(Pb_5Ge_3O_{11})$, $S_4(PbMoO_4)$, $D_{2d}(YVO_4)$) определялись стандартно. Проводилась численная минимизация среднеквадратичного отклонения экспериментальных и расчетных положений сигналов.

Точность в определении абсолютных положений сигналов ≤ 1 Г, относительных — на порядок выше.

Использовались СГ (1), (2), соответствующие локальной симметрии ПЦ, которые записаны в системах координат, где $\mathbf{Z} \parallel \mathbf{C}_n$ — главной оси симметрии кристалла, а направления \mathbf{X} и \mathbf{Y} в плоскости $\perp \mathbf{C}_n$ соответствовали экстремумам угловой зависимости ЭПР-переходов.

$$H = 1/3b_2^0O_2^0 + 1/60(b_4^0O_4^0 + b_4^4O_4^4) + 1/1260(b_6^0O_6^0 + b_6^4O_6^4 + b_6^6O_6^6) + g\beta(HS) + SAI + 1/3P_2^0O_2^0(I) - g_n\beta_n(HI) \quad (\text{для } S_4 \text{ и } D_{2d}), \quad (1)$$

$$H = 1/3b_2^0O_2^0 + 1/60(b_4^0O_4^0 \pm b_4^3O_4^3) + 1/1260(b_6^0O_6^0 \pm b_6^3O_6^3 \pm b_6^6O_6^6) + g\beta(HS) + SAI + 1/3P_2^0O_2^0(I) - g_n\beta_n(HI) \quad (\text{для } C_{3v}). \quad (2)$$

Все обозначения в выражениях (1) и (2) стандартные [1], двойной знак в (2) связан с доменным расщеплением [7].

Направления \mathbf{H} задавались углами Θ и φ . Во всех образцах в экстремальных ориентациях (при $\Theta = 0, \varphi = 0$ и $\Theta = 90^\circ, \varphi = 0.45^\circ$) наблюдались наиболее узкие сигналы ЭПР с (от 0.5–15 Г) с частично разрешенной СТС даже при естественном содержании изотопов гадолиния.

Вид СТС-сигналов ЭПР для нечетных изотопов Gd^{3+} в указанных кристаллах при СВЧ-частоте ~ 9.4 GHz и практически во всех ориентациях внешнего магнитного поля кроме $\mathbf{H} \parallel \mathbf{Z}$ отличается от классической „четверки“, описанной в [1]. Наглядный пример приведен на рис. 1 для Gd^{157} в $PbMoO_4$ в двух ориентациях. Видно, что при $\Theta = 90^\circ, \varphi = 0$ кроме трех интенсивных сигналов с отношением амплитуд 1:2:1,

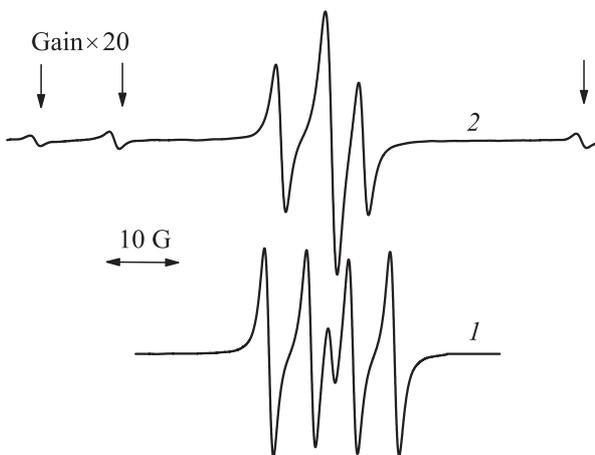


Рис. 1. Экспериментальная СТС сигналов ЭПР $PbMoO_4:Gd^{157}$ при $T = 100$ К в ориентациях 1 — $\Theta = 0, \varphi = 0$ ($1/2, m \leftrightarrow -1/2, m$), 2 — $\Theta = 90^\circ, \varphi = 0$ ($M, m \leftrightarrow M', m', M \leq -1/2, \Delta M \approx 1$). В центре — интенсивные РП с $\Delta m \approx 0$. Стрелками указаны переходы с $\Delta m \neq 0$.

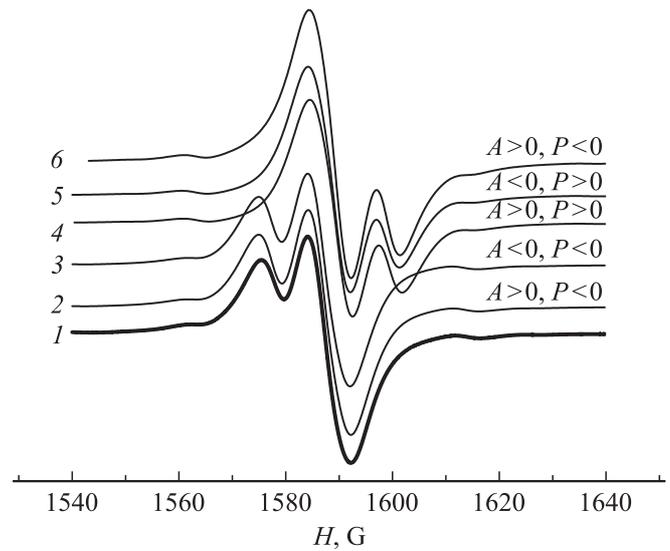


Рис. 2. 1 — наблюдаемая СТС сигнала ЭПР $PbMoO_4:Gd^{157}$ при $T = 100$ К в ориентации $\Theta = 90^\circ, \varphi = 45$ ($M, m \leftrightarrow M', m', M > -5/2, m \approx m', \Delta M \approx 1$). 2–5 — симулированные структуры при разных знаках A, P и $b_2^0 < 0, 6$ — при $b_2^0 > 0$.

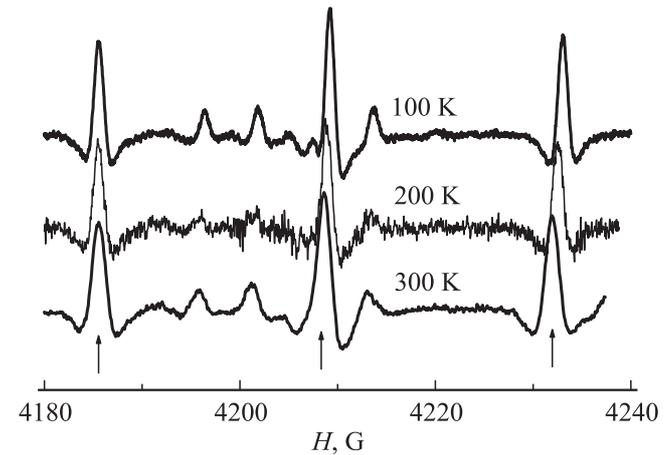


Рис. 3. Температурные изменения в положениях СТС компонент ЗП $5/2, m \leftrightarrow 1/2, m'$ ($\Theta = 0, \varphi = 0, 2$ -я производная) в $PbMoO_4:Gd^{157}$. Стрелками указаны переходы с $\Delta m \approx 1$, низкополевые сигналы совмещены по H .

наблюдаются еще несколько слабых, меньших по интенсивности на 2–3 порядка. СТС асимметрична по H (кроме перехода $1/2, m \leftrightarrow -1/2, m'$). На других ЭПР переходах СТС иная по виду (рис. 2). Наблюдаемая при этом разность в расщеплениях ΔH (рис. 1, 2) между интенсивными компонентами переходов $M, m \leftrightarrow M', m$ с $|M| > 1/2$ ($M > M'$) изменяется с ростом $|M|$, так что две компоненты могут слиться. Такая структура является главным свидетельством того, что $|P_2^0| > |A_\perp|$. Подобные СТС ЭПР-переходов наблюдаются в наших кристаллах.

Константы СТВ и КВ (далее считаем, что $P_2^0 = P$) нечетных изотопов оценивались с помощью программы

Таблица 1. Параметры спинового гамильтониана для $PbMoO_4 : Gd^{157}$ (в МГц)

Константа СГ	Температура, К							
	1.8	4.2	100	150	200	250	300	400
g_{\parallel}	1.9916 (9)	1.991 (6)	1.9921 (5)	1.9920 (6)	1.9920 (7)	1.9920 (6)	1.9921 (8)	1.9920 (5)
g_{\perp}	1.9916 (9)	1.991 (6)	1.9921 (5)	1.9920 (6)	1.9922 (7)	1.9922 (6)	1.9920 (8)	1.9920 (5)
b_2^0	-2500 (1)	-2500 (2)	-2482.6 (4)	-2464.7 (5)	-2446.6 (6)	-2429.9 (8)	-2396.1 (8)	-2361.8 (7)
b_4^0	-40.8 (3)	-40.7 (5)	-40.4 (3)	-39.8 (4)	-390.4 (2)	-38.8 (3)	-37.8 (4)	-36.8 (4)
b_6^0	0.3 (4)	0.3 (5)	0.2 (2)	0.2 (2)	0.2 (2)	0.3 (2)	0.2 (2)	0.3 (4)
b_4^4	-289 (3)	-288 (3)	-286.2 (9)	-283.7 (9)	-279.5 (8)	-277.2 (9)	-273 (1)	-266 (2)
P_2^0	-50.33 (1)	-50.3 (3)	-49.9 (3)	-49.7 (3)	-49.4 (3)	-49.2 (3)	-48.5 (3)	-47.5 (6)

Примечание. $A_{\parallel} = A_{\perp} = 16.1 (3)$ МГц при всех температурах из ЭПР-измерений, $a b_6^4 \approx 7 (9)$, $b_6^6 \approx 0 (5)$.

Таблица 2. Параметры спинового гамильтониана для $YVO_4 : Gd^{3+}$ (в МГц)

Константа СГ	Температура, К							
	1.8	4.2	100	130	170	200	300	400
g_{\parallel}	1.9919 (7)	1.9920 (9)	1.9923 (8)	1.9915 (7)	1.9920 (9)	1.9916 (6)	1.9917 (7)	1.9920 (8)
g_{\perp}	1.9919 (8)	1.9920 (9)	1.9920 (6)	1.9918 (6)	1.9920 (7)	1.9916 (6)	1.9916 (8)	1.9918 (6)
b_2^0	-1438 (2)	-1437 (3)	-1419.2 (5)	-1407.3 (5)	-1389.0 (5)	-1374.1 (5)	-1322.6 (6)	-1277.1 (9)
b_4^0	-4.9 (4)	-4.9 (8)	-4.7 (3)	-4.7 (3)	-4.5 (3)	-4.6 (2)	-4.2 (1)	-4.1 (2)
b_4^4	127 (3)	127 (4)	125.8 (8)	124.6 (8)	123.8 (8)	122.8 (7)	118.7 (9)	117 (2)
P_2^0	58.65 (1)	58.6 (5)	58.0 (5)	57.6 (5)	57.1 (5)	56.6 (5)	55.1 (5)	53.4 (5)

Примечание. $A_{\parallel} = A_{\perp} = 16.2 (5)$ МГц при всех температурах, $a b_6^4 \approx 2 (3)$, $b_6^6 \approx 1 (3)$.

Таблица 3. Параметры спинового гамильтониана для $Pb_5Ge_3O_{11} : Gd^{157}$ (в МГц)

Параметры СГ	Температура, К					
	1.8	4.2	100	120	200	300
g_{\parallel}	1.993 (2)	1.993 (3)	1.9918 (8)	1.9912 (8)	1.9913 (8)	1.9915 (7)
g_{\perp}	1.993 (2)	1.993 (2)	1.9920 (7)	1.9921 (8)	1.9922 (8)	1.9915 (8)
b_2^0	921 (3)	920 (3)	899.1 (8)	891.6 (8)	858.9 (9)	816.5 (6)
b_4^0	-123 (1)	-123 (2)	-121.1 (4)	-121.7 (4)	-120.6 (4)	-119.2 (2)
b_4^3	305 (40)	305 (50)	300 (30)	276 (45)	250 (50)	200 (30)
P_2^0	220 (3)	220 (3)	219.8 (5)	219.5 (5)	217.2 (5)	214.5 (5)

Примечание. $A_{\parallel} = 14.6 (3)$ МГц, $A_{\perp} = 15.0 (3)$, $b_6^3 \approx 0 (20)$, $b_6^6 \approx 0 (10)$.

симуляции вида СТС на всех ЭПР-переходах с хорошо разрешенной сверхтонкой структурой для разных ориентаций \mathbf{H} . В качестве первого шага проводилась диагонализация энергетической матрицы, используя полный СГ ((1) и (2)) с параметрами b_n^m , определенными для четных изотопов, и затравочными константами СТВ и КВ. Затем, с учетом формы линий ЭПР (лоренцовая, гауссовая, либо их смесь), строился вид СТС выбранного ЭПР-перехода. A_i , P и форма линий менялись до тех пор, пока резонансные относительные положения и вид экспериментальных и смоделированных сигналов не совпадали (см. рис. 2). Параметры СТВ A_{\parallel} , A_{\perp} и P были определены по относительным положениям РП и ЗП.

1. $PbMoO_4$. Здесь при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{Z}$, кроме РП, наблюдаются и ЗП (рис. 3), состоящие из трех СТС-компонент. Если расщепления в СТС для РП практически не зависят от величины P , то ΔH для ЗП естественно включает и P .

В ориентациях $\mathbf{H} \perp \mathbf{Z}$ величины ΔH на всех переходах зависят в основном от $|A_{\perp}|$ и P .

2. YVO_4 . СТС сигналов ЭПР в этом кристалле слабо разрешена из-за наложения компонент переходов разных изотопов. Для наиболее узких переходов $M \leftrightarrow M - 1$ ($|M| = 3/2, 1/2$) при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{Z}$ и $\mathbf{H} \perp \mathbf{Z}$ крайние СТС-компоненты Gd^{155} и Gd^{157} практически сливаются, что приводит к большим ошибкам в определении A_{\parallel} и A_{\perp} . Хотя расчеты предсказывают наличие ЗП при $\Theta = 0$, $\varphi = 0$, однако в нашем диапазоне СВЧ-частот можно было наблюдать лишь одну СТС-компоненту из возможных трех. При $\Theta = 90^\circ$, $\varphi = 0, 45^\circ$ наблюдаются ассиметричная СТС, сформированная как РП, так и ЗП, и обратная по виду СТС, описанной для $PbMoO_4$, если сравнивать ЭПР-переходы с близкими M . Отличие также в том, что в центре всегда имеется интенсивный сигнал от четного изотопа.

3. $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$. Во всех экстремальных ориентациях наблюдалась СТС ЭПР-сигналов, сформированная РП. Она асимметрична при $\Theta = 90^\circ$, $\varphi = 0-90^\circ$ и ЗП наблюдались лишь на узком и наиболее интенсивном переходе типа $1/2 \leftrightarrow -1/2$ на крыльях соседних сигналов. Здесь резонансные поля интенсивных сигналов таковы, что слабые ЗП практически всегда сливаются с ними.

Все полученные результаты приведены в табл. 1–3, откуда видно, что $A_{\parallel} \approx A_{\perp}$, поэтому далее мы опустим индексы у A_i . Заметим, что данные для $T = 1.8\text{ K}$ получены из ДЭЯР-измерений [6].

В исследуемых кристаллах практически все разрешенные ЭПР-переходы насыщались при больших уровнях СВЧ-мощности, особенно при низких температурах. ЗП в силу их малой вероятности, при этом только увеличивались по интенсивности. В процессе записи скачком менялось усиление так, чтобы уверенно наблюдались ЗП, а сигналы от РП не перегружали усилитель спектрометра (см. рис. 1).

1.1. Определение относительных знаков b_2^0 , P_2^0 . Наиболее явно влияние знаков b_2^0 и P_2^0 на вид СТС проявляется в ориентации $\mathbf{H} \perp \mathbf{Z}$. Для описания особенностей структуры, сформированной РП и ЗП при $|P| \geq |A|$, определим относительные положения всех компонент для перехода $M, m \leftrightarrow M', m'$ ($M > 1/2$, а $M - M' \approx 1$). ΔH легко получить, решив секулярное уравнение четвертого порядка (справедливо лишь для $I = 3/2$), как было сделано в работе [2]. Опустив малые члены типа $g_n \beta_n H m$ и $A_{\perp} g_n \beta_n H m / P < 1$, получим для энергий $E(M)$

$$\begin{aligned} E(M)_{1,3} &= \Delta_{\text{TC}} + g\beta H M + 1/2AM \\ &\quad \pm P \pm AM/2 \pm cM^2 \pm dM^3, \\ E(M)_{2,4} &= \Delta_{\text{TC}} + g\beta H M - 1/2AM \\ &\quad \pm P \pm AM/2 \pm cM^2 \pm dM^3, \end{aligned} \quad (3)$$

где $c = 3A^2/8P$, $d = 3A^3/16P^2$, а Δ_{TC} — вклад в E от параметров b_n^m .

Для $E_{1',3'}$ и $E_{2',4'}$ выражения аналогичны при замене M на M' .

Тогда для РП ($\Delta m \approx 0$ и $W_{mm'} \approx 1$, $n = n'$, $n, n' = 1-4$) получаем

$$\begin{aligned} H_{11'} &= H + c[M^2 - (M')^2] + d[M^3 - (M')^3], \\ H_{22'} &= H + A - c[M^2 - (M')^2] - d[M^3 - (M')^3], \\ H_{33'} &= H + c[M^2 - (M')^2] - d[M^3 - (M')^3], \\ H_{44'} &= H - A - c[M^2 - (M')^2] + d[M^3 - (M')^3], \end{aligned} \quad (4)$$

а для ЗП ($\Delta m \neq 0$ и $W_{mm'} \approx 3A^2/16P^2$, $n' = n \pm 2$) —

$$\begin{aligned} H_{13'} &= H + 2P - AM' + c[M^2 + (M')^2] + d[M^3 + (M')^3], \\ H_{24'} &= H + 2P + AM' + c[M^2 + (M')^2] - d[M^3 + (M')^3], \\ H_{31'} &= H - 2P + AM - c[M^2 + (M')^2] - d[M^3 + (M')^3], \\ H_{42'} &= H - 2P - AM - c[M^2 + (M')^2] + d[M^3 + (M')^3]. \end{aligned} \quad (5)$$

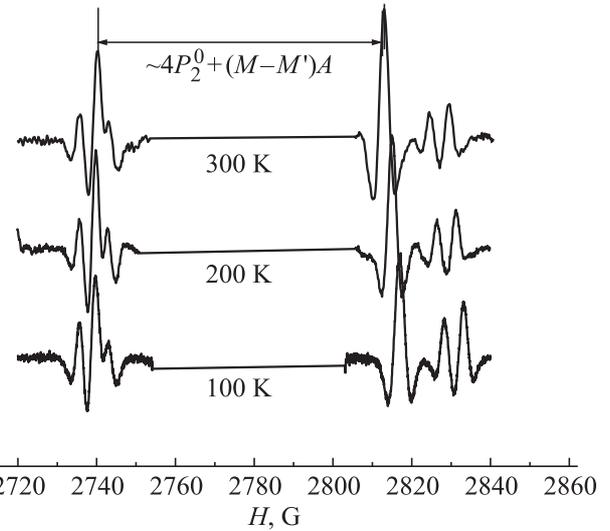


Рис. 4. Часть СТС-перехода $3/2, m \leftrightarrow 1/2, m'$ ($\Theta = 90$, $\varphi = 0$, 2-я производная) в $\text{YVO}_4:\text{Gd}^{3+}$, сформированная только ЗП нечетных изотопов при разных температурах. Крайние низкочастотные сигналы совмещены по H , интенсивные сигналы от четных изотопов вырезаны.

Как видно из (4) $H_{11'}$ и $H_{33'}$ практически одинаковы, т.е. две компоненты сливаются (например, для Gd^{157} в PbMoO_4 $d[M^3 - (M')^3] \approx 0.4\text{ G}$, а $|2c[M^2 - (M')^2]| \approx 1.4\text{ G}$ для $M \sim 3/2$, полуширина СТС-компонент перехода $3/2 \leftrightarrow 1/2 \approx 1.5\text{ G}$). $H_{22'}$ и $H_{44'}$ отнесены от центра, определяемого как $H_0 = 1/2(H_{11'} + H_{33'})$, на величину $\sim \pm A \sim 5.7\text{ G}$. Таким образом, мы получили структуру, состоящую из трех компонент с соотношением интенсивностей близким к 1:2:1 и расщеплением $\sim A$. Определим $\Delta H_{mm'} = H_{mm'} - H_0$. Из (4) видно, что для $M > 1/2$ $\Delta H_{22'} > \Delta H_{44'}$ при любом знаке A и $P < 0$, так как знак c определяется знаком P ($d < c$). Отсюда следует, что при $A > 0$, переход $44'$ наблюдается в меньших полях, чем $22'$, следовательно, СТС сжата со стороны меньших H , так как $2c[M^2 - (M')^2] < 0$. При $A < 0$ и $P < 0$ $H_{22'} < H_{44'}$, а $\Delta H_{22'} < \Delta H_{44'}$, т.е. сжатие СТС вновь со стороны низких полей. Таким образом, асимметрия СТС не зависит от знака A и определяется только знаками P , M и M' . Абсолютные значения проекций M, M' ЭПР перехода зависят от b_n^m , знаки которых известны из низкотемпературных исследований. Таким образом, анализ СТС для разных ЭПР-переходов приводит нас к выводу, что наблюдаемая асимметрия СТС в ориентации $\mathbf{H} \perp \mathbf{Z}$ определяется взаимными знаками наибольшего из параметров начального расщепления (здесь это b_2^0 и P_2^0).

1.2. Температурная зависимость параметров СТБ и КВ от температуры исследовались на образцах с примесью Gd^{3+} как с природным содержанием изотопов, так на обогащенных Gd^{157} . Ширина сигналов ЭПР возрастала с увеличением температуры, особенно в YVO_4 . Для $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}$ все

измерения проводились в сегнетофазе, вдали от температуры фазового перехода, где происходит перестройка структуры кристалла. Параметры b_n^m , полученные нами, совпадают в пределах ошибок эксперимента с результатами работ [8] для $PbMoO_4$ ($T = 300$ K), [9] — YVO_4 ($T = 4.2, 298$ K) и [7] — $Pb_5Ge_3O_{11}$ ($T = 100-300$ K).

Не было обнаружено температурных изменений компонент тензора СТВ для наших кристаллов, что связано с недостаточной точностью экспериментальных измерений. Тем не менее, наблюдаемая анизотропия (~ 0.4 G) для A_i в $Pb_5Ge_3O_{11}$ может указывать на то, что температурные вариации компонент тензора СТВ меньше этой величины. Величина $|P_2^0|$ заметно уменьшается с увеличением температуры, что видно прямо из экспериментальных спектров (см. рис. 3, 4). Из данных табл. 1–3 следует, что при указанных температурах отношение b_2^0/P_2^0 составляет 49.7 (4), -24.3 (6) и 4.0 (4) для Gd^{157} в $PbMoO_4$, YVO_4 и $Pb_5Ge_3O_{11}$ соответственно.

Ход температурной зависимости b_2^0 в изученных кристаллах, аналогичный описанной в [3,10] для Gd^{3+} в $PbWO_4$ и $CaWO_4$ также можно объяснить температурными изменениями параметров решетки и колебаниями решеточных ионов. Это приводит к зависимости потенциала кристаллического поля A_2^0 [1,10,11] и градиента электрического поля решетки на ПЦ, связанного с A_2^0 [1]. Следовательно, меняется и P_2^0 . Данных о температурных изменениях A_2^0 у нас нет. Наши же результаты указывают на то, что КВ изменяется практически пропорционально b_2^0 , поскольку отношение $b_2^0/P_2^0 \approx \text{const}$ для каждого из изученных кристаллов. Ранее в [12] мы уже указывали на корреляцию между значениями A_2^0 , b_2^0 и P_2^0 для набора разных кристаллов с примесью Gd^{3+} . Результаты данной работы указывают на пропорциональность двух параметров феноменологического СГ для каждого из выбранных кристаллов. Таким образом, мы предполагаем, что описание P_2^0 , предложенное в [12] в рамках суперпозиционной модели Ньюмена [13], получило экспериментальное подтверждение. Однако, отметим, что затравочные параметры в такой модели, зависящие от электростатических взаимодействий и вкладов перекрывания электронных оболочек ПЦ и ближайших анионов, возможно различны не только для разных по природе лигандов, но и кристаллов. Более того, при использовании модели Ньюмена для анализа локальной структуры вблизи ПЦ, следует учитывать не только изменения параметров решетки, но вклад в константы СГ от решеточных колебаний.

В заключении можно сказать, что ЭПР-исследования СТС нечетных изотопов гадолиния в разных кристаллах при условии $|P_2^0| > |A_{\perp}|$ позволяют измерить величину константы КВ при разных температурах. Асимметрия СТС в перпендикулярных ориентациях магнитного поля определяется относительными знаками P_2^0 и b_2^0 и не зависит от знака A_{\perp} . Отношение $b_2^0/P_2^0 \approx \text{const}$ (в пределах ошибок измерений) при любых температурах для конкретного кристалла. Это позволяет нам считать близкими механизмы, формирующие эти константы, и использовать этот факт при микротейоретических расчетах констант СГ.

Список литературы

- [1] А. Абрагам, Б. Блини. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Т. 1. Мир, М. (1972). 651 с.; Б. Блини. В сб.: Сверхтонкие взаимодействия в твердых телах / Под ред. Е.А. Турова. Мир, М. (1970). С. 15.
- [2] J.C. Danner, U. Ranon, D.N. Stamiros. Phys. Rev. B. **3**, 2141 (1971); J. Barak, A. Raizman, J.T. Suss. J. Magn. Res. **53**, 23 (1983).
- [3] S.V. Nistor, M. Stefan, E. Goovaerts, M. Nikl, P. Bohacek. J. Phys.: Cond. Matter. **18**, 719 (2006).
- [4] A.D. Gorlov, D.A. Gorlov. In: Book of Abstracts XIV Int. Feofilov Symp. on spectroscopy of crystals doped with rare earth and transition metal ions. St.-Petersburg, Russia (2010). P. 66.
- [5] A.D. Gorlov. In: Book of Abstracts Int. Conf. „Resonances in Condensed Matter“, Kazan, Russia (2011). P. 23.
- [6] А.Д. Горлов. „Сверхтонкие и суперсверхтонкие взаимодействия“ LAP LAMBERT Academic Publishing (2010). 193 с.
- [7] В.А. Важнин, Ю.А. Шерстков. ФТТ **17**, 2485 (1975).
- [8] И.Н. Куркин, Л.Я. Шекун. ФТТ **6**, 1975 (1964).
- [9] J. Rosental, R.F. Riley, U. Ranon. Phys. Rev. **177**, 625 (1969).
- [10] J.S.M. Harvey, H. Kieft. Can. J. Phys. **49**, 996 (1971).
- [11] W.M. Walsh, Jr, J. Jeener, N. Bloembergen. Phys. Rev. **139**, A1338 (1965).
- [12] L.I. Levin, A.D. Gorlov. J. Phys. Cond. Matter. **4**, N 4, 1981 (1992).
- [13] D.J. Newman, W. Urban. Adv. Phys. **24**, 793 (1975).