

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
**КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ**

**КАФЕДРА РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ**

Специальность: 011800.62 — радиофизика

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

(Бакалаврская работа)

**Квадрупольное взаимодействие ядра La в кристалле**  
**LaMnO<sub>3</sub>**

Работа завершена:

" \_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (Р.И. Тимуршин)

Работа допущена к защите:

Научный руководитель

к.физ.-мат. наук, доцент

" \_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (О.А. Аникеев)

Зав. кафедрой

доктор физ.-мат. наук

" \_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г. \_\_\_\_\_ (М.Н. Овчинников)

**Казань — 2015**

## СОДЕРЖАНИЕ

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Введение.....</b>                                      | <b>3</b>  |
| <b>Структура атомного ядра.....</b>                       | <b>5</b>  |
| <b>Электростатические сверхтонкие взаимодействия.....</b> | <b>6</b>  |
| <b>Метод вычисления.....</b>                              | <b>11</b> |
| <b>Вычисления.....</b>                                    | <b>15</b> |
| <b>Заключение.....</b>                                    | <b>23</b> |
| <b>Литература.....</b>                                    | <b>24</b> |

## Введение

Система частиц, движущихся в сферически-симметричном поле, не может иметь вращательного спектра энергий; в квантовой механике понятие вращения для такой системы вообще не имеет никакого смысла.

Разделение энергии системы на внутреннюю и вращательную части в квантовой механике вообще не имеет строгого смысла. Оно может иметь лишь приближенный характер и возможно в тех случаях, когда по тем или иным физическим причинам является хорошим приближением рассмотрение системы как совокупности частиц, движущихся в заданном поле, не обладающей сферической симметрией. Вращательная структура уровней появляется тогда как результат учета возможности вращения указанного поля по отношению к фиксированной системе координат. С таким случаем мы имели дело, например, в молекулах, электронные термы которых можно определять как уровни энергии системы электронов, движущихся в заданном поле фиксированных ядер.

Опыт показывает, что большинство ядер действительно не обладает вращательной структурой. Это означает, что хорошим приближением для них является сферически-симметричное самосогласованное поле, то есть ядра обладают (с точностью до квантовых флуктуаций) сферической формой.

Существует, однако, и такая категория ядер, которые обладают энергетическим спектром вращательного типа (сюда относятся ядра в интервалах атомных весов примерно  $150 < A < 190$  и  $A > 220$ ). Это их свойства означает, что приближение сферически-симметричного самосогласованного поля для них совершенно непригодно. Самосогласованное поле для этих ядер должно в принципе искаться без каких-либо предварительных предположений о характере его симметрий с тем, чтобы форма ядра определилась также «самосогласованным» образом. Опыт показывает, что

правильной моделью для ядер этой категории оказывается самосогласованное поле, имеющее ось симметрии и перпендикулярную к ней плоскость симметрии (то есть имеющие симметрию эллипсоида вращения). Представление о несферических ядрах наиболее полно было разработано в работах О.Бора и Моттельсона (A. Bohr, V. R. Mottelson, 1952-1953).

Подчеркнем, что мы имеем дело с двумя качественно различными категориями ядер. Это проявляется, в частности, в том, что ядра оказываются либо сферическими, либо несферическими с отнюдь не малой «степенью несферичности».

Возникновению несферичности способствует наличие в ядре незаполненных оболочек; существенную роль в этом явлении играет, по-видимому, также явление спаривания нуклонов. Напротив, замкнутость оболочек способствует сферичности ядра. Характерным в этом смысле является дважды магическое ядро  $^{208}_{82}Pb$ ; в силу резко выраженной замкнутости его нуклонной конфигурации это ядро (а также и близкие к нему ядра) является сферическим, что и приводит к появлению разрыва в ряду несферических тяжелых ядер.

Уровни энергии несферического ядра представляются суммой двух частей: уровней «неподвижного» ядра и энергии его вращения как целого. У четно-четных ядер интервалы вращательной структуры уровней оказываются при этом малыми по сравнению с расстояниями между уровнями «неподвижного» ядра.

## Структура атомного ядра

Классификация уровней несферического ядра во многом аналогична классификации уровней двухатомной молекулы (состоящей из одинаковых атомов), поскольку симметрия поля, в котором движутся частицы (нуклоны или электроны) в обоих случаях одинакова. Мы сможем поэтому непосредственно воспользоваться рядом результатов, полученных в гл. XI<sup>1</sup>).

Остановимся сначала на классификаций состояний « неподвижного ядра ». В поле с аксиальной симметрией сохраняется лишь проекция момента на ось симметрии. Поэтому каждое состояния ядра характеризуется прежде всего величиной  $\Omega$  проекции его полного момента<sup>2</sup> ), которая может иметь как целые, так и полуцелые значения.

## Электростатические сверхтонкие взаимодействия.

При вычислении уровней энергии атомов обычно полагают, что ядро является точечным объектом [2]. Изменения атомных уровней при учете конечных размеров ядра чрезвычайно малы и в случае отличных от нуля ядерных спинов проявляется в снятии вырождения атомных уровней, в связи с различными ориентациями ядерного спина. Гамильтониан, приводящий к такому расщеплению можно определить исходя из принципа соответствия. Если рассматривать ядро и электронные оболочки как два классических распределения заряда с плотностями  $\rho_n(\mathbf{r}_n)$  и  $\rho_e(\mathbf{r}_e)$ , то энергия их электростатического взаимодействия равна

$$W_E = \iint \frac{\rho_e(\mathbf{r}_e)\rho(\mathbf{r}_n)d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_n}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_e|}, \quad (1.1)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_e|} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{q=-k}^k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} C_k^q(\theta_n, \varphi_n) C_k^{q*}(\theta_e, \varphi_e), \quad (1.2)$$

где функции  $C_k^q(\theta, \varphi)$  представляют собой нормированные сферические гармоники. Считается, что  $r_e > r_n$ . Тогда энергию системы можно записать в виде

$$W_E = \sum_{k,q} A_k^q B_k^{q*} \quad (1.3)$$

$$A_k^q = \int \rho_n(\mathbf{r}_n) r_n^k C_k^q(\theta_n, \varphi_n) d\mathbf{r}_n \quad (1.4)$$

$$B_k^q = \int \rho_e(\mathbf{r}_e) r_e^{-(k+1)} C_k^q(\theta_e, \varphi_e) d\mathbf{r}_e. \quad (1.5)$$

Пусть состояние ядра описывается волновой функцией  $\Psi_n(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)$  от координат нуклонов ядра. Тогда плотность заряда ядра может быть записана как

$$\rho_n(\mathbf{r}_n) = \left( \Psi_{N_n} \left| \sum_{i=1}^{N_n} e_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right| \Psi_{N_n} \right), \quad (1.6)$$

где  $e_i$  равняется  $e$  для протона и нулю для нейтрона. Согласно формулам (4) и (5), величина  $A_k^q$  может быть представлена как среднее значение  $A_k^q = \langle A_k^q \rangle$ , причем ядерный оператор  $A_k^q$  определяется выражением

$$A_k^q = \sum_i e_i R_i^k C_k^q(\Theta_i, \Phi_i), \quad (1.7)$$

где  $R_i, \Theta_i, \Phi_i$  – полярные координаты нуклонов. Так же величина  $B_k^q$  является средним значением электронного оператора  $B_k^q$

$$B_k^q = -e \sum_{i=1}^N r_i^{-(k+1)} C_k^q(\theta_i, \varphi_i) \quad (1.8)$$

где  $r_i, \theta_i, \varphi_i$  – координаты электронов, а знак минус обусловлен отрицательным зарядом электрона ( $-e$ ). Таким образом, энергия электростатического взаимодействия является средним значением гамильтониана

$$H_E = \sum_{k,q} A_k^q B_k^{q*} \quad (1.9)$$

Как следует из определений (6) и (7), операторы  $A_k^q$  и  $B_k^q$  представляют собой тензорные операторы порядка  $k$ . Тензорный оператор  $A_k$ , имеющий  $2k + 1$  компонент  $A_k^q$ , называется ядерным мультипольным моментом порядка  $k$ .

Матричные элементы ядерных мультипольных операторов можно получить, исходя из тензорных свойств этих операторов и основываясь на теореме Вигнера-Эккарта. Согласно ей, величина  $A_k^q = \langle A_k^q \rangle$  в случае ядра со спином  $I$  может отличаться от нуля лишь при  $k \leq 2I$ . То есть ядра со спином  $I \geq 1$  могут обладать квадрупольными моментами. Слагаемое с  $k = 0$  в электростатическом взаимодействии электрона с ядром, соответствует взаимодействию с точечным зарядом  $Ze$ . Так как радиус ядра  $R$  намного меньше среднего радиуса электронных оболочек, то последовательные члены выражения  $W_E = \sum_{k,q} A_k^q B_k^{q*}$  убывают как  $R/a$ , где  $a$  средний радиус электронных оболочек.

Рассмотрим квадрупольные взаимодействия. Компоненты оператора ядерного квадрупольного момента можно записать как

$$A_2^0 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_n} \frac{e_i (3z_i^2 - r_i^2)}{r_i^5},$$

$$A_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{2}} \sum_{i=1}^{N_n} \frac{e_i z_i (x_i \pm iy_i)}{r_i^5}, \quad (1.10)$$

$$A_2^{\pm 2} = -\sqrt{\frac{3}{8}} \sum_{i=1}^{N_n} \frac{e_i (x_i \pm iy_i)^2}{r_i^5}.$$



Согласно теореме Вигнера-Эккарта, если спин ядра равен  $I$ , то оператор  $A_k^q$  обладает теми же матричными элементами между  $(2I + 1)$  состояниями с  $I_z = m$ , что и эрмитов тензорный оператор  $Q_k^q$ , составленный из компонент вектора  $I$ ,

$$\begin{aligned}
 Q_2^0 &= \langle I \| \alpha \| I \rangle \left( \frac{1}{2} \right) \{ 3I_z^2 - I(I+1) \}, \\
 Q_2^{\pm 1} &= \mp \langle I \| \alpha \| I \rangle \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} (I_z I_{\pm} + I_{\pm} I_z), \\
 Q_2^{\pm 2} &= \langle I \| \alpha \| I \rangle \sqrt{\frac{3}{8}} I_{\pm}^2.
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Константу  $\langle I \| \alpha \| I \rangle$  можно определить из условия равенства средних значений операторов  $Q_2^0$  и  $A_2^0$ . Состояние с  $I_z = I$ , обозначим как  $|II\rangle$ . Обычно принято обозначать символом  $eQ$  величину

$$eQ = \langle II | \sum_{i=1}^A e_i (3z_i^2 - r_i^2) | II \rangle. \tag{1.12}$$

Тогда, используя равенства

$$\begin{aligned}
 eQ &= 2 \langle II | Q_2^0 | II \rangle = 2 \langle II | A_2^0 | II \rangle = \\
 &= \langle I \| \alpha \| I \rangle \langle II | 3I_z^2 - I(I+1) | II \rangle,
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

Мы находим, что  $\langle I \| \alpha \| I \rangle = eQ / [I(2I - I)]$  и, следовательно,

$$\begin{aligned}
Q_2^0 &= \frac{eQ}{I(2I-1)} \frac{1}{2} \{3I_z^2 - I(I+1)\}, \\
Q_2^{\pm 1} &= \mp \frac{eQ}{I(2I-1)} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} (I_z I_{\pm} + I_{\pm} I_z), \\
Q_2^{\pm 2} &= \frac{eQ}{I(2I-1)} \sqrt{\frac{3}{8}} (I_{\pm})^2.
\end{aligned} \tag{1.14}$$

Компоненты  $B_2^q$  электронного тензора (7) можно переписать в форме, аналогичной записи  $A_2^q$  в соотношениях (9), т. е.

$$\begin{aligned}
B_2^0 &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \frac{e_i (3Z_i^2 - R_i^2)}{R_i^5}, \\
B_2^{\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{3}{2}} \sum_{i=1}^{N_e} \frac{e_i Z_i (X_i \pm iY_i)}{R_i^5}, \\
B_2^{\pm 2} &= -\sqrt{\frac{3}{8}} \sum_{i=1}^{N_e} \frac{e_i (X_i \pm iY_i)^2}{R_i^5},
\end{aligned} \tag{1.15}$$

где суммирование проводится по всем ионам кристаллической решетки.

## Метод вычисления

Рассмотрим двухцентровые матричные элементы кулоновского взаимодействия орбитальных электронов с ионами кристаллической решетки.

Пусть радиальная часть  $R_{nl}$  ионной орбитали  $|\psi_{nlm}(\mathbf{r})\rangle$ , на которой находится электрон, имеет вид разложения по гауссовскому типу орбиталей (GTO)

$$R_{nl} = \sum a_i r^l \exp(-\alpha_i r^2). \quad (1.1)$$

Пусть первый ион находится в узле с радиусом вектором  $\mathbf{R}_0 + \mathbf{r}_j$ ,  $\mathbf{R}_0 = 0$ . Второй ион в узле с радиусом вектором  $\mathbf{r}_b$ . А в узле с радиусом вектором  $\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p$  находится заряд  $q_p$ . Матричный элемент кулоновского взаимодействия электрона с зарядом  $q_p$ , вычисленный на волновых функциях первого и второго иона будет иметь вид

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{\xi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | -\frac{q_p}{|\mathbf{r} - (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p)|} | \psi_{\xi'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \rangle \\ &= \langle \psi_{\xi}(\mathbf{r}) | -\frac{q_p}{|\mathbf{r} - [\mathbf{R}_n + (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_j)]|} | \psi_{\xi'}[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_j)] \rangle \end{aligned} \quad (1.2)$$

Обозначим  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_j$ ,  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_n + (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_j)$ , где  $\mathbf{R}_n$  вектор  $n$ -ой элементарной ячейки кристалла,  $\mathbf{r}_j$  и  $\mathbf{r}_p$  - вектора ионов элементарной ячейки,  $\xi, \xi'$  - квантовые числа ионных орбиталей.

Определим функции  $F(n_1 n_2 n_3)$  следующим образом

$$\begin{aligned} 2\pi F(n_1 n_2 n_3) &= -q_p \sum a_i b_k \int \exp(-\alpha_i \mathbf{r}^2) x^{n_1} y^{n_2} z^{n_3} \\ &\quad \times |\mathbf{r} - \mathbf{R}|^{-1} \exp[-\beta_k (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2] dx dy dz \end{aligned} \quad (1.3)$$

Представим далее функции  $F(n_1 n_2 n_3)$  в форме, удобной для вычислений.

Для этого проведем преобразования, предложенные в работе [71]

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dv \exp\left[-(\mathbf{r} - \mathbf{R})^2 v^2\right], \quad (1.4)$$

$$v^2 = \frac{\alpha_{ik} u^2}{1 - u^2}, \quad \left(\frac{1}{\alpha_{ik} + v^2}\right)^{\frac{3}{2}} dv = \frac{du}{\alpha_{ik}}, \quad (1.5)$$

где  $\alpha_{ik} = \alpha_i + \beta_k$ . После преобразований (1.4), (1.5) интегрирование по  $x, y, z$  в (1.3) сводится к табличным интегралам [53], и для функции  $F(n_1 n_2 n_3)$  получаем следующее выражение

$$\begin{aligned} F(n_1 n_2 n_3) = & -q_p \sum a_i b_k \left(\frac{1}{\alpha_{ik}}\right) \int_0^1 du \prod_{s=1}^3 \left\{ n_s! \sum_{m_s=0}^{\lfloor \frac{n_s}{2} \rfloor} \frac{(1-u^2)^{m_s}}{(4\alpha_{ik})^{m_s} m_s!} \right. \\ & \left. \times \sum_{w_s=0}^{n_s-2m_s} \frac{[(R_s - c_s) u^2]^{n_s-2m_s-w_s}}{w_s! (n_s - 2m_s - w_s)!} c_s^{w_s} \right\} \\ & \times \exp\left[-\alpha_{ik} (\mathbf{R} - \mathbf{c})^2 u^2\right] \exp\left(-\frac{\alpha_i \beta_k}{\alpha_{ik}} \mathbf{r}_0^2\right), \end{aligned} \quad (1.6)$$

где  $\lfloor n_s / 2 \rfloor$  – целая часть от числа в скобках;  $x_{01} = x_0, x_{02} = y_0, x_{03} = z_0$  – обозначают координаты вектора  $\mathbf{r}_0$ ;  $c_s = \beta_k x_{0s} / \alpha_{ik}$  – обозначают компоненты вектора  $\mathbf{c}$ ;  $R_1 = R_x, R_2 = R_y, R_3 = R_z$  – обозначают координаты вектора  $\mathbf{R}$ .

Например, матричный элемент, вычисленный на функциях  $|p_z(\mathbf{r})\rangle$ , будет иметь вид

$$\langle p_z(\mathbf{r}) | -\frac{q_p}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} | p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \rangle = \frac{3}{2} [F(002) - z_0 F(001)]. \quad (1.7)$$

Вычисления по формулам (1.6), которые приводят рассматриваемые интегралы к виду подобному (1.7), не требуют программирования и легко вычисляются в режиме пользователя в среде «Математика»

Преобразуем приведенные выше выражения к одноцентровому виду, который необходим для конкретной рассматриваемой задачи.

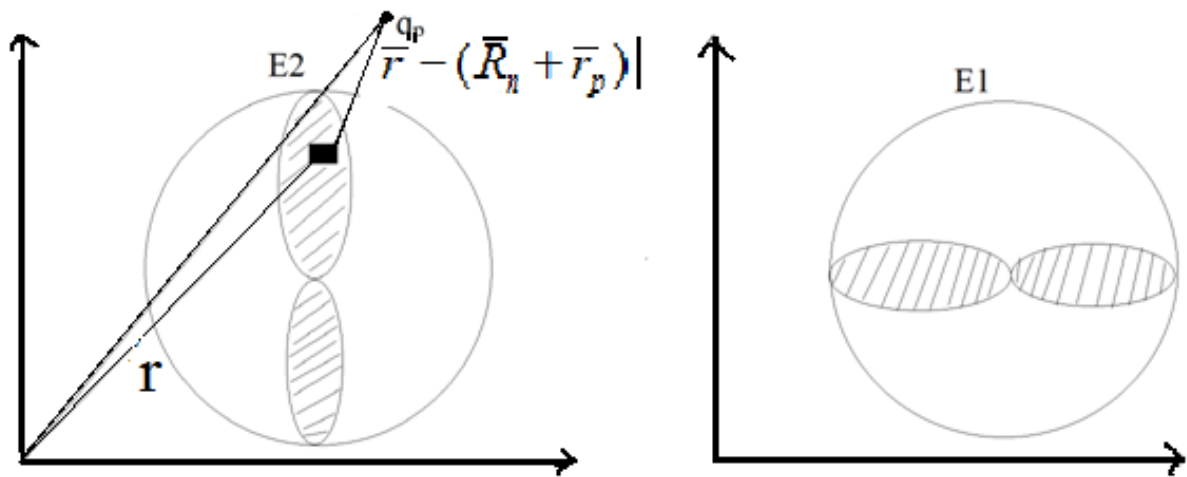


Рис. Заштрихованные области обозначают распределение протонов в ядре.

E1- энергия взаимодействия ядра в x ориентации.

E2- энергия взаимодействия ядра в z ориентации.

$\Delta E = E1 - E2$ , - разница энергии взаимодействия ядра с решеткой в зависимости от ориентации ядер, так как каждое состояние ядра характеризуется величиной  $\Omega$  проекции его полного момента.



0.5384}, {0.27441, 0.69342, 0.5384}, {0.27441, 0.69342,  
 0.9616}, {0.22559, 0.19342, 0.9616}, {0.5, 0, 0}, {0.5, 0,  
 0.5}, {0, 0.5, 0.5}, {0, 0.5, 0}}

m1 – n1

{{0., 0., 0.}, {0.51562, 0.5, 0.}, {0.5, 0.40198, 0.5}, {0.01562,  
 0.90198, 0.5}, {0.08233, 0.43842, 0.}, {0.43329, 0.93842,  
 0.}, {0.93329, 0.46356, 0.5}, {0.58233, -0.03644, 0.5}, {0.7334,  
 0.25757, -0.2116}, {0.78222, 0.75757, -0.2116}, {0.78222, 0.75757,  
 0.2116}, {0.7334, 0.25757, 0.2116}, {0.2334, 0.14441,  
 0.2884}, {0.28222, 0.64441, 0.2884}, {0.28222, 0.64441,  
 0.7116}, {0.2334, 0.14441,  
 0.7116}, {0.50781, -0.04901, -0.25}, {0.50781, -0.04901,  
 0.25}, {0.00781, 0.45099, 0.25}, {0.00781, 0.45099, -0.25}}

$$a = 5.5367, b = 5.7473, c = 7.6929$$

$$a: = 10.462850804173272$$

$$b: = 10.860827284632553$$

$$c: = 14.537479898030337$$

$$a) n_x = 0 \text{исключается}, n_x = (-N, -1), (1, N), n_y = (-N, N), n_z = (-N, N)$$

$$b) n_x = 0, n_y = 0 \text{исключается}, n_y = (-N, -1), (1, N); n_z = (-N, N)$$

$$c) n_x = 0, n_y = 0, n_z = 0 \text{исключается}, n_z = (-N, -1), (1, N)$$

$$\text{Sum}[3*(a^2*(n_x)^2 -$$



$$\begin{aligned}
& c^2*(nz)^2*(1/(a^2*nx^2 + b^2*ny^2 + c^2*nz^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.08233)^2 - \\
& c^2*(nz)^2*(1/(a^2*(nx + 0.08233)^2 + b^2*(ny + 0.43842)^2 + \\
& c^2*nz^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.7334)^2 - \\
& c^2*(nz - 0.2116)^2*(1/(a^2*(nx + 0.7334)^2 + \\
& b^2*(ny + 0.25757)^2 + c^2*(nz - 0.2116)^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.2334)^2 - \\
& c^2*(nz + 0.2884)^2*(1/(a^2*(nx + 0.2334)^2 + \\
& b^2*(ny + 0.1441)^2 + c^2*(nz + 0.2884)^2))^{(5/2)} + \\
& 3*(a^2*(nx + 0.50781)^2 - \\
& c^2*(nz - 0.25)^2*(1/(a^2*(nx + 0.50781)^2 + \\
& b^2*(ny - 0.04901)^2 + c^2*(nz - 0.25)^2))^{(5/2)}, \{nx, -150, -1\}, \{ny, -150, 150\}, \{nz, -150, 150\}]
\end{aligned}$$

0.0008092784031225513

a)

-150 → 0.0051383188594934836

300 → 0.0007208142505399068

b)

350 → -0.0006986089285665141

-350 → 0.0006079009391091766

c)

450 → -0.0010515142558055544

-450 → 0.0008092784031225513

$nx = 0, ny = 0, nz = 0$

Sum[-2\*(a^2\*(nx + 0.08233)^2 -

$c^2*(nz)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.08233)^2 + b^2*(ny + 0.43842)^2 +$   
 $c^2*nz^2))^{(5/2)} -$

$2*(a^2*(nx + 0.7334)^2 -$

$c^2*(nz - 0.2116)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.7334)^2 +$

$b^2*(ny + 0.25757)^2 + c^2*(nz - 0.2116)^2))^{(5/2)} -$

$2*(a^2*(nx + 0.2334)^2 -$

$c^2*(nz + 0.2884)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.2334)^2 +$

$b^2*(ny + 0.1441)^2 + c^2*(nz + 0.2884)^2))^{(5/2)} +$

$3*(a^2*(nx + 0.50781)^2 -$

$c^2*(nz - 0.25)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.50781)^2 +$

$b^2*(ny - 0.04901)^2 + c^2*(nz - 0.25)^2))^{(5/2)}, \{nx, 0,$

$0\}, \{ny, 0, 0\}, \{nz, 0, 0\}]$

0.00824151

0.00824150895198903 + 0.0051383188594934836 + 0.0007208142505399068 - \

0.0006986089285665141 + 0.0006079009391091766 - 0.0010515142558055544 \

+ 0.0008092784031225513`

0.01376769821988208

$n_x, n_y, n_z$  — любые

Sum[3\*(a^2\*(n\_x + 0.51562)^2 -

$$c^2*(n_z)^2)*(1/(a^2*(n_x + 0.51562)^2 + b^2*(n_y + 0.5)^2 + c^2*n_z^2))^{(5/2)} -$$

2\*(a^2\*(n\_x + 0.4332)^2 -

$$c^2*(n_z)^2)*(1/(a^2*(n_x + 0.4332)^2 + b^2*(n_y + 0.93842)^2 + c^2*n_z^2))^{(5/2)} -$$

2\*(a^2\*(n\_x + 0.78222)^2 -

$$c^2*(n_z - 0.2116)^2)*(1/(a^2*(n_x + 0.78222)^2 + b^2*(n_y + 0.75757)^2 + c^2*(n_z - 0.2116)^2))^{(5/2)} -$$

2\*(a^2\*(n\_x + 0.28222)^2 -

$$c^2*(n_z + 0.2884)^2)*(1/(a^2*(n_x + 0.28222)^2 + b^2*(n_y + 0.64441)^2 + c^2*(n_z + 0.2884)^2))^{(5/2)} +$$

3\*(a^2\*(n\_x + 0.50781)^2 -

$$c^2*(n_z + 0.25)^2)*(1/(a^2*(n_x + 0.50781)^2 + b^2*(n_y - 0.04901)^2 + c^2*(n_z + 0.25)^2))^{(5/2)}, \{n_x, -50,$$

50\}, \{n\_y, -50, 50\}, \{n\_z, -50, 50\}]

\$Aborted

100-> -0.0062315585255664566

50-> -0.006231693885008557

$nx, ny, nz$  – любые

$\text{Sum}[3*(a^2*(nx + 0.5))^2 -$

$c^2*(nz + 0.5)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.5)^2 + b^2*(ny + 0.40198)^2 +$

$c^2*(nz + 0.5)^2))^{(5/2)} -$

$2*(a^2*(nx + 0.93329))^2 -$

$c^2*(nz + 0.5)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.93329)^2 +$

$b^2*(ny + 0.46356)^2 + c^2*(nz + 0.5)^2))^{(5/2)} -$

$2*(a^2*(nx + 0.78222))^2 -$

$c^2*(nz + 0.2116)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.78222)^2 +$

$b^2*(ny + 0.75757)^2 + c^2*(nz + 0.2116)^2))^{(5/2)} -$

$2*(a^2*(nx + 0.28222))^2 -$

$c^2*(nz + 0.7116)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.28222)^2 +$

$b^2*(ny + 0.64441)^2 + c^2*(nz + 0.7116)^2))^{(5/2)} +$

$3*(a^2*(nx + 0.00781))^2 -$

$c^2*(nz + 0.25)^2)*(1/(a^2*(nx + 0.00781)^2 +$

$b^2*(ny + 0.45099)^2 + c^2*(nz + 0.25)^2))^{(5/2)}, \{nx, -120,$

$120\}, \{ny, -120, 120\}, \{nz, -120, 120\}]$

$100 \rightarrow -0.0004801920115296059$

$50 \rightarrow -0.00047997140752772596$

$nx, ny, nz$  – любые

$\text{Sum}[3*(a^2*(nx + 0.01562))^2 -$

$$\begin{aligned}
& c^2*(nz + 0.5)^2*(1/(a^2*(nx + 0.01562)^2 + \\
& \quad b^2*(ny + 0.90198)^2 + c^2*(nz + 0.5)^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.58233)^2 - \\
& \quad c^2*(nz + 0.5)^2*(1/(a^2*(nx + 0.58233)^2 + \\
& \quad \quad b^2*(ny - 0.03644)^2 + c^2*(nz + 0.5)^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.7334)^2 - \\
& \quad c^2*(nz + 0.2116)^2*(1/(a^2*(nx + 0.7334)^2 + \\
& \quad \quad b^2*(ny + 0.25757)^2 + c^2*(nz + 0.2116)^2))^{(5/2)} - \\
& 2*(a^2*(nx + 0.2334)^2 - \\
& \quad c^2*(nz + 0.7116)^2*(1/(a^2*(nx + 0.2334)^2 + \\
& \quad \quad b^2*(ny + 0.14441)^2 + c^2*(nz + 0.7116)^2))^{(5/2)} + \\
& 3*(a^2*(nx + 0.00781)^2 - \\
& \quad c^2*(nz - 0.25)^2*(1/(a^2*(nx + 0.00781)^2 + \\
& \quad \quad b^2*(ny + 0.45099)^2 + c^2*(nz - 0.25)^2))^{(5/2)}, \{nx, -100, \\
& 100\}, \{ny, -100, 100\}, \{nz, -100, 100\}]
\end{aligned}$$

$$100 \rightarrow -0.01020483313564027$$

$$50 \rightarrow -0.010204504259713884$$

$$0.01376769821988208 - 0.006231693885008557 - 0.00047997140752772596 - \backslash$$

$$0.010204504259713884 \Delta$$

$$-0.00314847$$

$$-0.003148471332368087*(3/2)$$

$$-0.00472270699855213 \cdot 57$$

Выпишем искомую разность энергий в атомных единицах

$$\Delta E = -0.269194$$

Переведем полученные численные значения в атомных единицах в МГц

$$-0.26919429891747143 \cdot 6.58 \cdot 10^9 \cdot 10^{-10}$$

$$-0.17713 \text{ МГц}$$

В работе [2] дан фактор антиэкранировки Штернхаймера. Он равен 20.

И окончательно получаем разность энергий равной  $\sim 3.5$  МГц.

Экспериментально наблюдаемая величина квадрупольного расщепления для переходов  $\pm 1/2, \pm 3/2$  равна  $\sim 3.6$  МГц [7]

## Заключение

В работе вычислено квадрупольное взаимодействие ядра иона лантана в кристалле  $\text{LaMnO}_3$ . В отличие от работ, имеющихся в литературе, где ядро рассматривается как точка, в данной работе ядро рассматривается как протяженный объект с размерами порядка ядра лантана. Полученное согласие по порядку величины говорит о том, что работа в данном направлении может быть продолжена, с учетом предлагаемых моделей ядра.

## Литература

- [1] Ландау, Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц/ – М.: Наука, 1974. – Т.Ш. – 752 с.
- [2] Абрагам, А. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов / А.Абрагам, Б.Блини. – М.: Мир, 1973. – Т.1. – 651 с.; Т. 2. – 349 с.
- [3] Anikeenok, O.A. Approach to calculation of long-range Coulomb interactionmatrix elements in ion crystals Magn. Resonance in Solids.EJ. – 2011.- V.13. – №2. – P.27-35.
- [4] Аникеенок, О.А. Кристаллическое поле на примесных центрах в ионных кристаллах / О.А.Аникеенок // ФТТ. – 2005. – Т.47. – №6. – С.1065-1070.
- [5] Прудников, А.П. Интегралы и ряды / А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.И.Маричев. – М.: Наука, 1981. – 800 с.
- [6] Капустина, Т.В. Компьютерная система МАТЕМАТИКА для пользователей / Т.В.Капустина. – М.: СОЛОН-Р, 1999. – 240 с.
- [7] A.Trokiner, S.Verkhovskii, A.Gerashenko, Z.Volkova, O.Anikeenok, K. Mikhalev, M. Eremin, L. Pinsard-Gaudard. Phys. Rev. B. – 2013. – V.87. – N.12. – P.125142(1-6).