

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Направление: 03.03.02 Физика

Профиль: Физика

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ШТАРКОВСКОЙ СТРУКТУРЫ
И ЭФФЕКТА ФАРАДЕЯ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ
ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ ИОНОВ Nd^{3+} В КРИСТАЛЛЕ CaF_2**

Студент 4 курса группы 06-712

«__» _____ 2021 г.

(Хасанова Э.И.)

Научный руководитель

д-р ф.-м. н, профессор

«__» _____ 2021 г.

(Малкин Б.З.)

Заведующий кафедрой теоретической физики

д.ф.-м.н., профессор

«__» _____ 2021 г.

(Прошин Ю.Н.)

Содержание

Введение.....	3
Глава 1. Теория эффекта Фарадея	
§1. Электромагнитные волны в материальной среде.....	5
§2. Динамическая магнитная (диэлектрическая) восприимчивость разбавленного парамагнетика во внешних постоянном и переменном магнитных полях.....	7
§3. Эффект Фарадея.....	8
§4. Расчёт недиагональной компоненты тензора магнитной (диэлектрической) восприимчивости.....	11
Глава 2. Тетрагональный центр редкоземельного иона в кристалле CaF_2	
§1. Локальная структура решётки кристаллов со структурой флюорита, активированных ионами редкоземельных элементов	15
§2. Гамильтониан иона Nd^{3+} в кристаллическом поле.....	19
§3. Параметры кристаллического поля и g-факторы.....	21
§4. Расчёт эффективного оператора электрического момента.....	23
Глава 3. Зависимость угла поворота плоскости поляризации электромагнитного излучения от частоты при магнитных и электрических дипольных переходах ${}^4\text{I}_{9/2} - {}^4\text{F}_{3/2}$ в ионах Nd^{3+}	28
Заключение	33
Список литературы.....	34

Введение

В настоящее время интерес для физических исследований представляет регистрация спиновых шумов [1]. Спиновые шумы регистрируются с использованием эффекта Фарадея в оптических спектрах парамагнитных ионов. В связи с этим целью нашей работы является теоретическое описание спектров фарадеевского вращения в кристалле CaF_2 , легированном ионами Nd^{3+} .

Соответственно поставленной цели были обозначены следующие задачи для научной исследовательской работы:

- Определение характеристик примесных центров, наблюдаемых в эксперименте:
 - расчёт параметров кристаллического поля в рамках модели обменных зарядов,
 - корректирование результатов вычислений шарковской структуры мультиплетов иона Nd^{3+} с использованием экспериментальных данных.
- Построение оператора эффективного электрического дипольного момента $4f$ электронов.
- Расчет магнитной и диэлектрической проницаемостей во внешнем постоянном магнитном поле в области частот оптических переходов в ионе Nd^{3+} .

Методы теоретического исследования, применённые в данной работе:

- Квантовая статистическая физика. Квантовая теория линейного отклика системы на внешнее возмущение.
- Теория кристаллического поля. Модель обменных зарядов.
- Методы расчёта шарковской структуры спектров парамагнитных ионов.

В первой главе представлено теоретическое описание эффекта Фарадея и обоснована его зависимость от магнитной и диэлектрической

восприимчивостей. Во второй главе рассмотрена изучаемая нами система, приведена структура гамильтониана и построен оператор эффективного электрического дипольного момента. В последней главе работы представлены результаты расчетов спектров фарадеевского вращения.

Глава 1. Теория эффекта Фарадея

§1. Электромагнитные волны в материальной среде

Электромагнитное поле в среде в отсутствие свободных зарядов и токов описывается уравнениями Максвелла:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0, \quad (3)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (4)$$

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}, \quad (5)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \vec{H} + 4\pi \vec{M}, \quad (6)$$

где \vec{E} и \vec{H} - векторы электрического и магнитного полей, \vec{D} и \vec{B} - векторы электрической и магнитной индукции, ε - диэлектрическая и μ - магнитная проницаемости. $\vec{P} = \alpha \vec{E}$ - электрическая поляризация, и $\vec{M} = \chi \vec{H}$ - намагниченность, α и χ - электрическая и магнитная восприимчивости. В анизотропной среде восприимчивости и проницаемости являются тензорами второго ранга.

Из решения уравнений Максвелла мы можем получить уравнение электромагнитной волны:

Домножим уравнение 1, векторно, слева на оператор градиента:

$$[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{E}]] = -\frac{1}{c} \left[\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right]. \quad (7)$$

Двойное векторное произведение раскрываем:

$$[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{E}]] = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E}. \quad (8)$$

Из уравнений (3) и (5) следует $\varepsilon \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$,

$$\left[\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{E}] \right] = -\vec{\nabla}^2 \vec{E}. \quad (9)$$

Рассмотрим правую часть. Операторы производных по координатам можем поменять местами с производной по времени. Используя уравнения (2), (5) и (6), получим:

$$\left[\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{B}}{c \partial t} \right] = \frac{\mu}{c} \frac{\partial}{\partial t} [\vec{\nabla} \times \vec{H}] = \frac{\mu \varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (10)$$

Приравняв левую и правую части с соответствующими коэффициентами, получим волновое уравнение:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (11)$$

где

$$\frac{\mu \varepsilon}{c^2} = \frac{1}{v^2}, \quad (12)$$

$v = c/n$ – скорость волны, $n = (\varepsilon \mu)^{1/2}$ - показатель преломления. Найдём решение данного уравнения:

$$E = E_1(z - vt) + E_2(z + vt), \quad (13)$$

где E_1 и E_2 – произвольные функции. Аргумент функции E_1 соответствует распространению волны вдоль положительного направления оси z . Таким образом, можем получить уравнение для бегущей волны:

$$E = E_0 \cos(kz - \omega t). \quad (14)$$

Аналогичным способом можно получить уравнение для напряжённости магнитного поля бегущей волны:

$$H = H_0 \cos(kz - \omega t). \quad (15)$$

Здесь ω – частота, $k = \omega/v$ – волновой вектор.

§2. Динамическая магнитная (диэлектрическая) восприимчивость разбавленного парамагнетика во внешних постоянном и переменном магнитных полях

Рассмотрим образец, находящийся в постоянном магнитном поле [2]. Вдоль оси z , перпендикулярно поверхности образца распространяется электромагнитная волна.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$\mathcal{H}_s = \sum_k [\mathcal{H} - B_x(t)M_x], \quad (16)$$

где суммирование проводится по парамагнитным ионам с магнитным моментом \vec{M} , $B_x(t)$ – магнитное поле волны, распространяющейся вдоль оси z .

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - B_z M_z, \quad (17)$$

где \mathcal{H}_0 – гамильтониан иона в кристаллическом поле, B_z – постоянное магнитное поле, $B_x(t) = B_1(\exp(-i\omega t) + \exp(i\omega t))$ – переменное магнитное поле электромагнитной волны с частотой ω , B_1 – амплитуда поля на заданном парамагнитном ионе. Собственные значения и собственные функции Гамильтониана иона \mathcal{H} обозначим как $E_p(B_z)$ и $|p, B_z\rangle$.

В линейном приближении индуцированный волной магнитный момент иона запишем в виде:

$$\langle M_x(t) \rangle = \chi_{xx}(\omega, B_z) B_1 \exp(-i\omega t) + \text{к. с.}, \quad (18)$$

где $\chi_{xx}(\omega, B_z) = \text{Re}\chi_{xx}(\omega, B_z) + i\text{Im}\chi_{xx}(\omega, B_z)$, – динамическая магнитная восприимчивость. Комплексная магнитная проницаемость принимает вид

$$\mu_{xx}(\omega, B_z) = 1 + 4\pi\chi_{xx}(\omega, B_z). \quad (19)$$

Аналогичным образом можно рассмотреть взаимодействие образца с переменным электрическим полем волны и получить подобное выражение для динамической диэлектрической восприимчивости и комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\alpha_{xx}(\omega, B_z) = \text{Re}\alpha_{xx}(\omega, B_z) + i\text{Im}\alpha_{xx}(\omega, B_z), \quad (19a)$$

$$\varepsilon_{xx}(\omega, B_z) = 1 + 4\pi\alpha_{xx}(\omega, B_z). \quad (19б)$$

§3. Эффект Фарадея

Рассмотрим световую волну, распространяющуюся в положительном направлении оси z , перпендикулярном поверхности прозрачного образца в магнитном поле. Также учтём, что образец намагничён параллельно положительному направлению оси z (т. е. $\vec{H} \parallel z$). Магнитная индукция световой волны в однородной прозрачной материальной среде описывается тензором магнитной проницаемости, $\hat{\mu}$. Если среда изотропна или свет распространяется вдоль осей симметрии третьего или четвертого порядка кубического кристалла, то в отсутствие внешнего постоянного поля три диагональных элемента тензора $\hat{\mu}$ вырождаются, т. е. $\mu_{xx} = \mu_{yy} = \mu_{zz}$. Когда внешнее постоянное магнитное поле приложено (или образец намагничён) в направлении z , тензор $\hat{\mu}$ содержит отличные от нуля недиагональные элементы $\mu_{xy} = -\mu_{yx} = i\mu'$, и вырождение будет снято, т. е. $\mu_{xx} = \mu_{yy} \neq \mu_{zz}$. Недиagonalный элемент является чисто мнимым, если не учитывать поглощение света (см. ниже). В первом приближении недиагональные элементы пропорциональны внешнему магнитному полю (или спонтанной намагничённости образца) и удовлетворяют следующему неравенству $|\mu'| \ll |\mu_{xx}|, |\mu_{yy}|$. В результате тензор магнитной проницаемости можно записать в виде [3]:

$$\hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & -i\mu' & 0 \\ i\mu' & \mu_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Так же из уравнений (1-6) следует:

$$\vec{k}^2 \vec{H} - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} \vec{B} = 0. \quad (21)$$

Мы получаем из уравнения (21):

$$(n^2 \delta_{ij} - \mu \varepsilon) \vec{H} = 0, \quad (22)$$

где $i, j = \{x, y, z\}$. Чтобы получить нетривиальное решение, при подстановке в предыдущее уравнение выражения для тензора магнитной проницаемости

(полагаем диэлектрическую проницаемость равной единице), должно выполняться следующее характеристическое уравнение,

$$\det \begin{vmatrix} n^2 - \mu_{xx} & -i\mu' & 0 \\ i\mu' & n^2 - \mu_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & n^2 - \mu_{zz} \end{vmatrix} = 0. \quad (23)$$

Тогда показатели преломления для двух нормальных мод задаются следующим выражением

$$n_{\pm}^2 = \mu_{xx} \pm \mu', \quad (24)$$

где знаки плюс и минус соответствуют состояниям световой волны с правой круговой поляризацией (RCP), $H_+ = H_x + iH_y$, и левой круговой поляризацией (LCP), $H_- = H_x - iH_y$, соответственно. Предыдущее уравнение показывает, что недиагональные компоненты тензора магнитной проницаемости имеют важное значение для магнитооптической активности (МОА), поскольку моды RCP и LCP будут вырождаться при исчезновении μ' . Так же из этого уравнения мы можем получить $(n_+^2 - n_-^2) = (n_+ - n_-)(n_+ + n_-) = 2\mu'$. Так как разница между показателем преломления для двух циркулярно поляризованных световых мод RCP и LCP обычно невелика, т. е. $(n_+ - n_-) \ll (n_+ + n_-)$, мы можем написать:

$$(n_+ - n_-) = \mu'/n, \quad (24a)$$

где $n = (n_+ + n_-)/2$. Теперь мы рассмотрим линейно-поляризованный свет, который можно записать как линейную комбинацию света RCP и LCP. Поскольку линейно поляризованный свет попадает в среду от $z = 0$ до $z = l$, то суммарная разность фаз Δ между двумя противоположно поляризованными модами RCP и LCP задаётся выражением: $\Delta = (\Psi_+ - \Psi_-) = \frac{2\pi l}{\lambda}(n_+ - n_-)$, где λ – длина волны в вакууме, и $\Psi_{\pm} = k_{\pm}l$ – фазовые сдвиги световых волн RCP и LCP. Так же мы имеем $\alpha_F = \frac{1}{2}(\Psi_+ - \Psi_-)$, где α_F – это угол Фарадеевского вращения в данном образце. В общем случае, когда все элементы тензора магнитной проницаемости $\hat{\mu}$ являются комплексными величинами, т. е. $\mu_{ik} = \mu_{1ik} - i\mu_{2ik}$, две поляризованные по кругу компоненты ослабляются в разной

степени, и распространяющаяся световая волна становится эллиптически поляризованной. В этом случае большая ось эллипса поворачивается за счет эффекта Фарадея на угол α_F относительно направления оси электрического поля падающего света. Угол α_F представлен на рисунке 1.

$$\alpha_F = \frac{\omega l}{2c} (n_+ - n_-). \quad (25)$$

Для большинства материалов, которые почти прозрачны и в которых наблюдается эффект Фарадея, значения $k_{\pm} - k$ очень малы [4]. В этом случае эллиптичность ε_F , определяемая как отношение малой оси B к большой оси A светового эллипса, будет равна,

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \left(\frac{B}{A}\right)_F = -\frac{\omega l}{2c} (m_+ - m_-) = \\ &= \frac{l}{4} (\beta_+ - \beta_-), \quad (26) \end{aligned}$$

где m -мнимая часть комплексного показателя преломления $\eta = n - im$, $\mu = \mu_1 - i\mu_2 = \eta^2$, $\beta_{\pm} = \frac{4\pi}{\lambda} m_{\pm}$ являются коэффициентами для оптического поглощения световых волн RCP и LCP, λ – длина световой волны в вакууме.

Таким образом, в общем случае угол поворота в эффекте Фарадея α_F и эллиптичность ε_F пропорциональны недиагональным элементам μ' тензора магнитной проницаемости:

$$\alpha_F - i\varepsilon_F = \frac{\omega l}{2c} \frac{\mu'}{\sqrt{\mu_{xx}}}. \quad (27)$$

Подставим в данное выражение формулу (7), чтобы получить зависимость угла поворота от магнитной восприимчивости [5]:

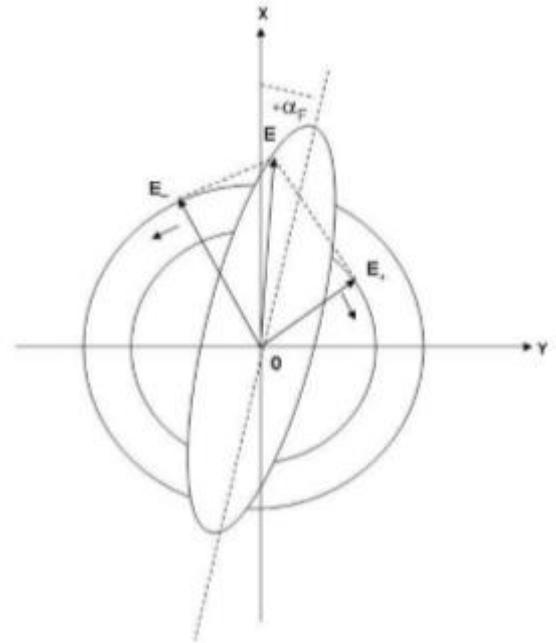


Рис.1. Распространение линейно-поляризованного света через оптически активную среду.

$$\alpha_F - i\varepsilon_F = \frac{\omega l i}{2c} \frac{4\pi\chi_{yx}}{\sqrt{1 + 4\pi\chi_{xx}}}, \quad (27a)$$

где учтено, что:

$$\mu' = i\mu_{yx}. \quad (28)$$

Рассматривая среду с величиной магнитной проницаемости $\hat{\mu} = \hat{1}$ и не равной единице диэлектрической проницаемостью, аналогичным образом получим:

$$(n_+ - n_-) = \frac{\varepsilon'}{n}, \quad (24б)$$

где $\varepsilon' = i\varepsilon_{yx}$.

Таким образом, угол поворота плоскости поляризации (25) будет зависеть от диэлектрической проницаемости и восприимчивости (19а).

§4. Недиагональные компоненты тензора динамической магнитной (диэлектрической) восприимчивости во внешнем магнитном поле

Приведём расчёт недиагональной компоненты тензора магнитной восприимчивости для разбавленного парамагнетика в магнитном поле $\vec{B}(t)$ электромагнитной волны, следуя работе [6]. Запишем гамильтониан парамагнитного иона в виде:

$$H = H_0 + \vec{B}(t)\vec{M}, \quad (29)$$

где H_0 - гамильтониан иона в кристаллическом поле, \vec{M} – оператор магнитного момента иона. Среднее значение магнитного момента равно:

$$\langle \vec{M}(t) \rangle = Sp(\vec{M}\rho(t)), \quad (30)$$

где ρ - матрица плотности. Запишем уравнение движения для матрицы плотности:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)], \quad (31)$$

$$\rho(t) = \rho_0 + \Delta\rho(t), \quad (32)$$

где ρ_0 – матрица плотности в отсутствие возмущения. Подставим (32) в уравнение (31), так же, учитывая выражение для гамильтониана (29), получаем

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H_0 + \vec{B}(t)\vec{M}, \rho_0 + \Delta\rho(t)], \quad (33)$$

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \{ [\vec{B}(t)\vec{M}, \rho_0] + [H_0, \Delta\rho(t)] \}. \quad (34)$$

Колебания вектора магнитного поля совершаются параллельно оси y :

$$\vec{B}(t) = (0, B_y \exp(-i\omega t), 0). \quad (35)$$

Таким образом, слагаемое, соответствующее возмущению, в матрице плотности будет иметь вид:

$$\Delta\rho(t) = \Delta\rho \exp(-i\omega t). \quad (36)$$

Запишем уравнение (34), рассмотрев матричные элементы в базисе собственных функций оператора H_0 для состояний с энергиями E_k :

$$-i\omega \Delta\rho_{kp} = \frac{1}{i\hbar} \{ B_y M_{y,kp} (\rho_{0p} - \rho_{0k}) + \Delta\rho_{kp} (E_k - E_p) \}, \quad (37)$$

$$\Delta\rho_{kp} = \frac{M_{y,kp} (\rho_{0p} - \rho_{0k})}{\hbar(\omega - \omega_{kp})} B_y, \quad (38)$$

где M_i – компоненты операторы магнитного момента. Мы имеем следующее выражение для намагниченности вдоль оси x :

$$\langle M_x(t) \rangle = \chi_{xy} B_y(t). \quad (39)$$

С другой стороны, для этой же компоненты находим:

$$\begin{aligned} \langle M_x(t) \rangle &= \sum_{k,p>k} [M_{x,pk} \Delta\rho(t)_{kp} + M_{x,kp} \Delta\rho(t)_{pk}] \\ &= \sum_{k,p>k} \left[\frac{M_{y,pk} M_{x,kp} (\rho_{0k} - \rho_{0p})}{\hbar(\omega - \omega_{pk})} - \frac{M_{x,pk} M_{y,kp} (\rho_{0k} - \rho_{0p})}{\hbar(\omega + \omega_{pk})} \right] B_y(t). \end{aligned} \quad (40)$$

Получим выражение для недиагональной компоненты тензора магнитной восприимчивости:

$$\chi_{xy} = \sum_{k,p>k} \frac{1}{\hbar} (\rho_{0p} - \rho_{0k}) \left[\frac{M_{y,pk} M_{x,kp}}{(\omega - \omega_{pk})} - \frac{M_{x,kp}^* M_{y,pk}^*}{(\omega + \omega_{pk})} \right]. \quad (41)$$

Учтём, что компоненты оператора магнитного момента являются комплексными величинами:

$$M_{x,kp} = \text{Re}M_{x,kp} + i\text{Im}M_{x,kp}, \quad M_{y,pk} = \text{Re}M_{y,pk} + i\text{Im}M_{y,pk}. \quad (42)$$

После преобразований получим выражения для реальной и мнимой частей недиагональной компоненты тензора магнитной восприимчивости:

$$\begin{aligned} \text{Re}\chi_{xy} = & \sum_{k,p>k} \frac{2\omega_{pk}}{\hbar(\omega^2 - \omega_{pk}^2 + \gamma_{pk}^2)} (\rho_{0p} \\ & - \rho_{0k}) [\text{Re}M_{y,pk} \text{Re}M_{x,kp} - \text{Im}M_{y,pk} \text{Im}M_{x,kp}], \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{xy} = & \sum_{k,p>k} \frac{2\omega}{\hbar(\omega^2 - \omega_{pk}^2 + \gamma_{pk}^2)} (\rho_{0p} \\ & - \rho_{0k}) [\text{Re}M_{y,pk} \text{Im}M_{x,kp} - \text{Im}M_{y,pk} \text{Re}M_{x,kp}]. \end{aligned} \quad (44)$$

Реальная часть магнитной восприимчивости (43) определяет поглощение электромагнитной волны, а мнимая – поворот плоскости поляризации [7]. Мы рассматриваем среду без поглощения, таким образом, нам необходимо учитывать только мнимую часть. Параметр γ введен в (43) и (44) с целью учета ширины оптического перехода. Так же отметим, что $\text{Im}\chi_{xy} = -\text{Im}\chi_{yx}$, поскольку реальная и мнимая части эрмитовой матрицы компоненты магнитного момента являются соответственно симметричной и антисимметричной матрицами.

Выражение для мнимой части диэлектрической восприимчивости может быть получено аналогичным образом из рассмотрения взаимодействия электрического поля падающей волны $\vec{E}(t)$ с электрическим дипольным моментом парамагнитного иона:

$$\begin{aligned}
Im\alpha_{xy} = & \sum_{k,p>k} \frac{2\omega}{\hbar(\omega^2 - \omega_{pk}^2 + \gamma_{pk}^2)} (\rho_{0p} \\
& - \rho_{0k}) [ReD_{y,pk}ImD_{x,kp} - ImD_{y,pk}ReD_{x,kp}], \quad (44a)
\end{aligned}$$

где \hat{D} оператор электрического дипольного момента электронов иона неодима.

Глава 2. Тетрагональный центр иона Nd^{3+} в кристалле CaF_2

§1. Локальная структура решётки кристаллов со структурой флюорита, активированных ионами редкоземельных элементов

Кристаллы фторидов щелочно-земельных металлов со структурой флюорита состоят из трёх гранцентрированных кубических подрешёток с ребром элементарного куба $2r_0$. Подрешётки из ионов фтора сдвинуты относительно подрешётки металла вдоль пространственной диагонали элементарного куба соответственно на $(\sqrt{3}/2)r_0$ и $(3\sqrt{3}/2)r_0$. Каждый ион фтора находится в центре тетраэдра из ионов металла, а ионы металла, в свою очередь, находятся в центрах кубов из ионов фтора. Такому расположению соответствуют точечные группы симметрии T_d для тетраэдра и O_h для куба. Элементарной ячейкой для данных кристаллов будет являться ромбоэдр с объёмом $v_0 = 2r_0^3$, образованный векторами трансляции

$$\vec{a}_1 = r_0(1,1,0), \quad \vec{a}_2 = r_0(1,0,1), \quad \vec{a}_3 = r_0(0,1,1). \quad (45a)$$

Базис кристаллической решётки будет состоять из следующих векторов:

$$\vec{r}(Me) = (0,0,0); \quad \vec{r}(F_1) = \frac{r_0}{2}(1,1,1); \quad \vec{r}(F_2) = \frac{r_0}{2}(3,3,3). \quad (45)$$

Примесные редкоземельные ионы в кристаллах фторидов щелочно-земельных металлов изоморфно замещают ионы металла и могут находиться в двух- или трёхвалентном состоянии. Статические и динамические характеристики активированных кристаллов определяются изменениями силовых постоянных, отвечающих взаимодействию замещённого катиона с ионами матрицы. Редкоземельные ионы образуют в ионных кристаллах примесные центры малого радиуса. Электронные оболочки, локализованные на примесном ионе, заметно перекрываются только с электронными оболочками ионов из первой координационной сферы для данного примесного иона (рис. 1).

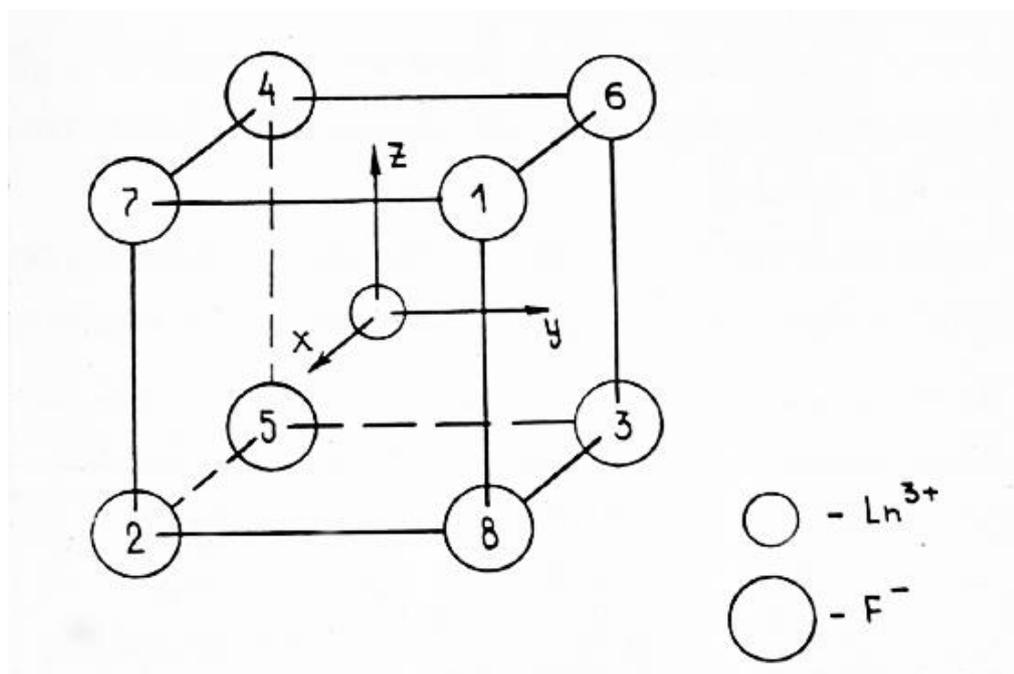


Рис.1. Ближайшее окружение примесных редкоземельных ионов в MeF_2 .

На рисунке 1 изображена первая конфигурационная сфера примесного иона, цифрами обозначены ионы фтора.

Внедрение примесных ионов в решётку обуславливает локальную деформацию и поляризацию, поскольку изменяются силы, действующие на ионы, окружающие примесный ион.

Чтобы компенсировать избыточный заряд трёхвалентных редкоземельных ионов, замещающих катионы Me^{2+} в кристаллах со структурой флюорита, ионы фтора локализуются в ближайших междуузлиях вдоль кристаллографических осей C_3 или C_4 . Они образуют соответственно тригональные или тетрагональные центры. По мере увеличения разности ионных радиусов катиона и иона Ln^{3+} энергетически более выгодно образование тригональных центров. Тригональные центры характерны для ионов второй половины ряда лантаноидов в кристаллах SrF_2 и BaF_2 .

Электростатическое притяжение между редкоземельным ионом и ионом-компенсатором приводит к их смещению из узлов регулярной решётки вдоль оси симметрии центра, окружающие ионы смещаются вдоль и перпендикулярно этой оси (рис. 2).

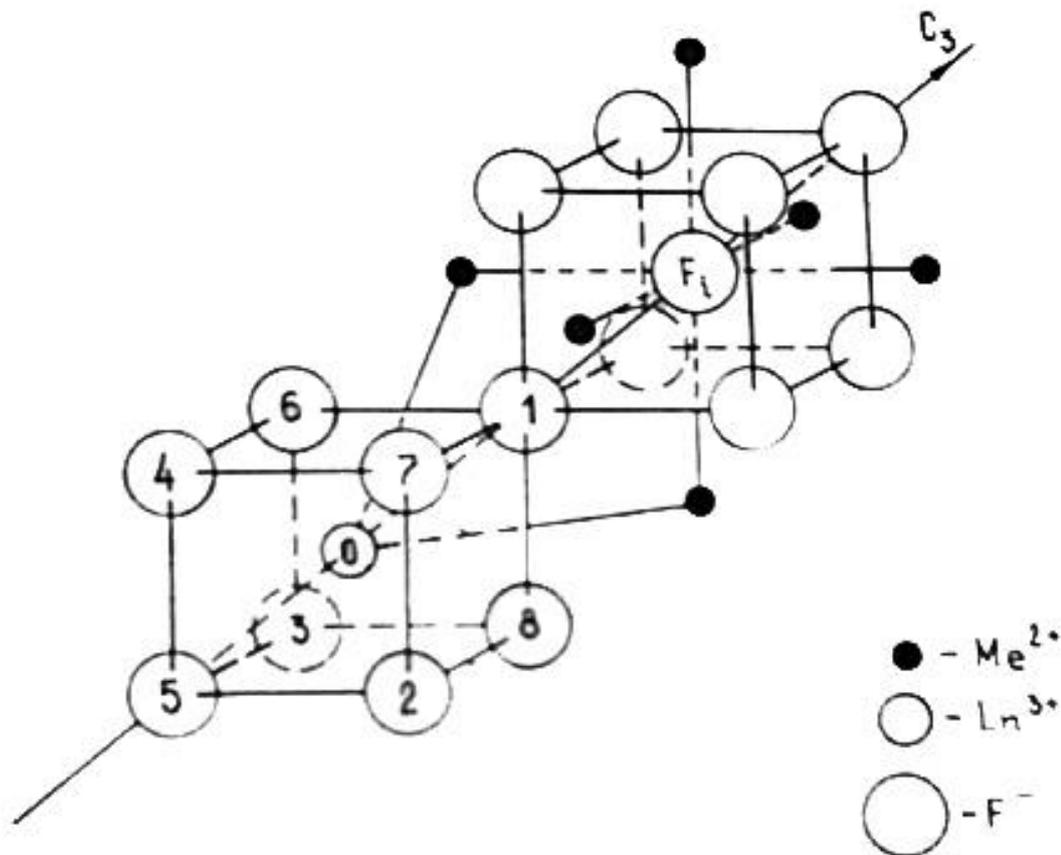


Рис. 2. Фторовый тригональный центр в кристалле $\text{MeF}_2:\text{Ln}^{3+}$.

В тетрагональных центрах вследствие существенного сближения иона-компенсатора и редкоземельного иона, сопровождаемого расталкиванием находящихся между ними четырёх ионов фтора, необходимо включить ион-компенсатор в первую координационную оболочку трёхвалентного редкоземельного иона. Обозначенные на рисунке 3 основные структурные параметры тетрагональных центров различных редкоземельных ионов от Pr^{3+} до Tm^{3+} равны: $R_i = 2,484 - 2,457 \text{ \AA}$; $R_1 = 2,485 - 2,336 \text{ \AA}$; $R_2 = 2,582 - 2,453 \text{ \AA}$; $\theta_1 = 62,5 - 63,1$ градуса; $\theta_2 = 50,7 - 51$ градуса [8].

Редкоземельные ионы смещаются из узла регулярной решётки к междуузельному иону на $0,20 - 0,18 \text{ \AA}$. Компоненты векторов смещений четырёх ионов фтора $F_{2',3',5',8'}$ вдоль и перпендикулярно оси симметрии центра соответственно равны $0,10 - 0,08 \text{ \AA}$ и $0,11 - 0,09 \text{ \AA}$.

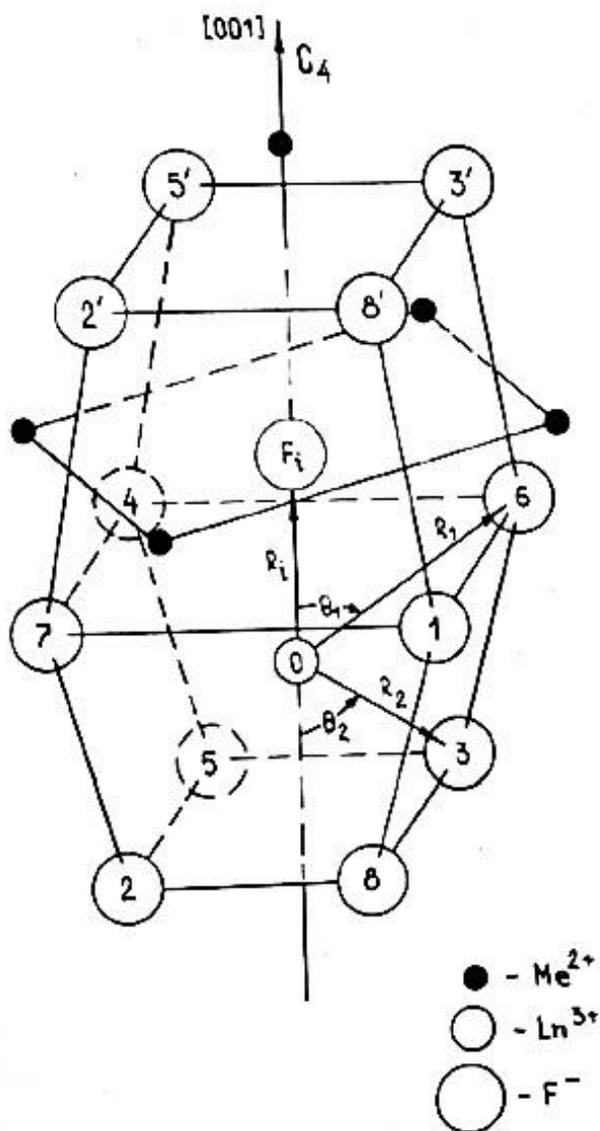


Рис.3.
Структура тетрагонального центра в кристалле $MeF_2:Ln^{3+}$.

§2. Гамильтониан иона Nd^{3+} в кристаллическом поле

Гамильтониан иона в кристалле имеет вид:

$$H = H_0 + H_{cf} + H_z + H(t). \quad (46)$$

В формуле (46) приведены слагаемые, отвечающие кинетической энергии и энергии электростатического взаимодействия 4f электронов с ядром и между собой (H_0), спин-орбитальному взаимодействию, Зеемановскому взаимодействию с постоянным магнитным полем и слагаемое, зависящее от времени, является взаимодействием с переменным электромагнитным полем падающей волны.

Дираком было показано, что энергия спин-орбитального взаимодействия, в случае центрально-симметричного потенциала, действующего на электрон, имеет вид:

$$H_{so} = \xi(r) \vec{l} \cdot \vec{s}, \quad (47)$$

где

$$\xi(r) = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}, \quad (48)$$

\vec{l} и \vec{s} - операторы орбитального и спинового моментов электрона, $U(r)$ – потенциал, создаваемый остовом атома [9].

Рассмотрим взаимодействие иона с кристаллическим полем, создаваемым соседними атомами.

В модели точечных зарядов (pc) каждый лиганд создаёт электрическое поле, действующее на электроны неодима. Заряд лиганда eq_L и координаты (R, Θ, Φ) . Координаты электрона, локализованного на ионе неодима (r, θ, φ) , тогда энергия взаимодействия:

$$H_{cf}^{(pc)} = - \frac{e^2 q_L}{|\vec{R} - \vec{r}|}. \quad (49)$$

Знаменатель можно разложить по сферическим функциям, если учесть, что электроны неодима находятся намного ближе к ядру, которое является началом координат, чем соседние ионы:

$$H_{cf}^{(pc)} = -e^2 q_L \times \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi r^l}{(2l+1)R^{l+1}} Y_l^m(\Theta, \Phi) Y_l^{m*}(\theta, \varphi). \quad (50)$$

Энергию иона в потенциале, создаваемом лигандами можем представить в виде разложения по операторам Стивенса:

$$H_{cf}^{(pc)} = \sum B_l^{m(pc)} O_l^m. \quad (51)$$

Коэффициентами в разложении являются параметры кристаллического поля:

$$B_l^{m(pc)} = -e^2 K_{lm} \langle r^l \rangle \sum_L \frac{q_L}{R^{l+1}} O_l^m(\Theta, \Phi), \quad K_{lm} = \frac{a_{lm}^2}{2}, \quad m \neq 0, \quad K_{l0} = a_{lm}^2. \quad (52)$$

Помимо влияния на ион неодима за счёт создаваемого лигандами электрического поля, следует учитывать при построении гамильтониана 4f электронов перекрывание их волновых функций (φ) с волновыми функциями электронов, локализованных на соседних атомах (ψ_L). Данный вклад учитывается в модели обменных зарядов [10]. Соответствующая энергия пропорциональна заряду с плотностью $2eS_L\varphi^*\psi_L$, который называется обменным. Здесь $S_L = \langle \psi_L | \varphi \rangle$ – интеграл перекрывания волновых функций. В модели обменных зарядов рассматриваемой энергии сопоставляется оператор:

$$H_{cf}^{(ec)} = \sum B_l^{m(ec)} O_l^m, \quad (53)$$

где коэффициенты равны

$$B_l^{m(ec)} = e^2 K_{pq} \frac{2(2p+1)}{[(2l+1)(2l'+1)]^{1/2}} \sum_L \frac{S_p^{nl,n'l'}(R)}{R} O_l^m(\Theta, \Phi), \quad (54)$$

$$S_p^{nl,n'l'}(R) = \sum_{n'',l'',m} G_{n'',l'',m}^{nl,n'l'} (-1)^m \begin{pmatrix} l & l' & p \\ -m & m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l' & p \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \times \langle n, l, m | n'', l'', m \rangle \langle n'', l'', m | n', l', m \rangle. \quad (55)$$

Таким образом, полный гамильтониан иона в кристаллическом поле имеет вид:

$$H_{cf} = H_{cf}^{(pc)} + H_{cf}^{(ec)} = \sum [B_l^{m(pc)} + B_l^{m(ec)}] O_l^m = \sum B_l^m O_l^m. \quad (56)$$

§3. Параметры кристаллического поля и g-факторы

В программе Mathcad были рассчитаны собственные значения и собственные векторы гамильтониана ионов неодима в тетрагональных центрах. С использованием экспериментальных данных [11] для уровней энергии иона Nd^{3+} в кристалле CaF_2 , были получены значения для параметров кристаллического поля:

Таблица 1. Параметры кристаллического поля B_n^m в $см^{-1}$ для ионов Ce^{3+} и Nd^{3+} в тетрагональном центре кристалла CaF_2 .

	Nd^{3+}	Nd^{3+}	Ce^{3+}
B_2^0	313.4	415.4	392
B_4^0	-100.4	-110.4	-110
B_4^4	-1448.1	-1410	-1857
B_6^0	90.7	92.7	101
B_6^4	-960.7	-952.7	-1059

В таблице 1 в первом столбце представлены параметры кристаллического поля, полученные при расчёте по формулам (52, 54, 55) в рамках модели обменных зарядов. Во втором столбце приведены параметры кристаллического поля после корректировки при сравнении с экспериментальными значениями уровней энергии. Так же для сравнения

приведены параметры для церия в том же кристалле CaF_2 , взятые из литературы [12].

В таблице 2 представлены уровни энергии и g-факторы подуровней основного и первого возбуждённого мультиплетов иона Nd^{3+} в тетрагональном центре кристалла CaF_2 . Данные значения рассчитаны при параметрах кристаллического поля из таблицы 1. Так же приведены экспериментальные значения [11].

Таблица 2. Уровни энергии и g-факторы.

	Exper.	Theory 1	Theory 2	g_{\parallel}	g_{\perp}
${}^4I_{9/2}$	0	0	0	4.382 - Теория1 4.412 –экспер. 4.412 –Теория2	1.335 - Теория1 1.301-экспер. 1.3004 –Теория2
	82	82	86	2.6634	2.2817
	198	188	199	1.0785	2.5114
	-	319	320	4.2779	0.9180
	746	714	726	1.1722	3.0407
${}^4I_{11/2}$	2032	2030	2030	6.0868–T2 6,9+/- 0.6-эксп.	1.5111–T2 -
	2086	2083	2089	3.0519–T2	0.7146–T2
	2096	2095	2100	1.2762–T2 0.9+/- 0.6-эксп.	4.2886–T2 2.4+/-0.6-эксп.
	2105	2112	2112	0.7931–T2 -	4.2917–T2 3.5+/-0.4-эксп.

	2354	2338	2345	5.0193–Т2	1.8342–Т2
	2462	2439	2454	1.3953–Т2 1.6+/- 1.1 эксп.	5.5251–Т2 4.8+/-1.1-эксп.

§4. Расчёт параметров оператора электрического дипольного момента

Рассмотрим результат влияния на систему внешнего постоянного электрического поля \vec{E} . Полный гамильтониан редкоземельного иона будет иметь при этом следующий вид:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V, \quad (57)$$

где \mathcal{H}_0 – гамильтониан иона без учёта эффективного взаимодействия с постоянным электрическим полем. Данное взаимодействие рассматриваем как возмущение V [13].

Эффективное взаимодействие V складывается из следующих компонент:

$$V = V' + \mathcal{H}_{\text{неч}}, \quad (58)$$

V' - взаимодействие электрического момента иона \vec{D} с электрическим полем \vec{E} :

$$V' = \sum_{\alpha} -D_{\alpha} E_{\alpha}, \quad D_{\alpha} = \sum_{\alpha} -e x_{\alpha}, \quad (59)$$

где сумма по α – сумма по x, y, z осям.

$\mathcal{H}_{\text{неч}}$ – взаимодействие с нечётным кристаллическим полем в случае локальной симметрии C_{4v} :

$$\mathcal{H}_{\text{неч}} = B_{10} O_{10} + B_{30} O_{30} + B_{50} O_{50} + B_{54} O_{54}, \quad (60)$$

O_{mn} – операторы Стивенса, выражающиеся через сферические функции.

Параметры кристаллического поля [12]:

$$B_{10} = 4320, \quad B_{30} = 262, \quad B_{50} = 57, \quad B_{54} = -84, \quad (61)$$

(cm^{-1}), V_{mn} – компоненты матрицы возмущения, которое содержит координаты электрона, изменяющие знак при инверсии, откуда следует, что в первом приближении возмущение равно нулю. Рассмотрим второй порядок:

$$V_{mn2} = \sum_k \frac{V_{mk} \cdot V_{kn}}{E_m - E_k} = -\frac{1}{\Delta} \sum_k V_{mk} \cdot V_{kn}, \quad (62)$$

данные матричные элементы не равны нулю для переходов с $4f$ подуровня на $5d$ состояния, суммирование по $5d$ состояниям (k), $\Delta = 5 \cdot 10^4 \text{cm}^{-1}$.

Для получения эффективного оператора дипольного момента будем учитывать слагаемые в V_{mn2} линейные по \vec{E} :

$$V_{mn} = -\frac{1}{\Delta} \sum_k (V_{mk}' \mathcal{H}_{kn} + \mathcal{H}_{mk} V_{kn}'). \quad (63)$$

Приведём расчёт для z – компоненты:

$$V_{mn} = -\frac{1}{\Delta} \sum_k E_z \cdot e (z_{mk} \mathcal{H}_{kn} + \mathcal{H}_{mk} z_{kn}), \quad (64)$$

$$z_{mk} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{3m} * Y_{2k}^* \cos\theta \cdot r, \quad (65)$$

где $r = \langle 4f|r|5d \rangle$ - интеграл на радиальных $4f$ и $5d$ волновых функциях иона Nd^{3+} , равный 0,3953 ангстрем.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nk} = & B_{10} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{3k} Y_{2n}^* O_{10} + B_{30} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{3k} Y_{2n}^* O_{30} \\ & + B_{50} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{3k} Y_{2n}^* O_{50} \\ & + B_{54} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{3k} Y_{2n}^* O_{54}. \end{aligned} \quad (66)$$

1. 00 – компонента возмущения: $V_{00} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot 2 \cdot z_{00} \cdot \mathcal{H}_{00}$

$$z_{00} = \frac{3 \cdot r}{\sqrt{35}}$$

$$(O_{10})_{00} = \frac{3}{\sqrt{35}}$$

$$(O_{30})_{00} = \frac{8}{3\sqrt{35}}$$

$$(O_{50})_{00} = \frac{80\sqrt{35}}{231}$$

$$(O_{54})_{00} = 0$$

$$V_{00} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot r \cdot 3,05$$

2. 11 – компонента возмущения: $V_{11} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot 2 \cdot z_{11} \cdot \mathcal{H}_{11}$

$$z_{11} = \frac{4 \cdot r}{\sqrt{70}}$$

$$(O_{10})_{11} = \frac{4}{\sqrt{70}}$$

$$(O_{30})_{11} = \frac{4}{3\sqrt{70}}$$

$$(O_{50})_{11} = -\frac{400}{33\sqrt{70}}$$

$$(O_{54})_{11} = 0$$

$$V_{11} = \frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot r \cdot 25,6$$

3. 22 – компонента возмущения: $V_{22} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot 2 \cdot z_{22} \cdot \mathcal{H}_{22}$

$$z_{22} = \frac{r}{\sqrt{7}}$$

$$(O_{10})_{22} = \frac{1}{\sqrt{7}}$$

$$(O_{30})_{22} = -\frac{4}{3\sqrt{7}}$$

$$(O_{50})_{22} = \frac{40}{33\sqrt{7}}$$

$$(O_{54})_{22} = 0$$

$$V_{22} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot r \cdot 8,3$$

4. 3-1 – компонента возмущения: $V_{3-1} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot \mathcal{H}_{3-1} z_{-1-1}$

$$(O_{54})_{3-1} = \frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{21}}$$

$$V_{3-1} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot r \cdot 0,05$$

5. 2-2 – компонента возмущения: $V_{2-2} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot 2 \cdot \mathcal{H}_{2-2} z_{-2-2}$

$$(O_{54})_{2-2} = \frac{8\sqrt{7}}{231}$$

$$V_{2-2} = -\frac{1}{\Delta} \cdot E_z \cdot e \cdot r \cdot 0,07$$

Таблица 3. Матрица оператора возмущения V .

		3	2	1	0	-1	-2	-3
	3	0	0	0	0	$-\frac{1}{\Delta} 0,05 \cdot r$	0	0
	2	0	$-\frac{1}{\Delta} 8,3 \cdot r$	0	0	0	$-\frac{1}{\Delta} 0,07 \cdot r$	0
	1	0	0	$\frac{1}{\Delta} 25,6 \cdot r$	0	0	0	0
$V =$	0	0	0	0	$-\frac{1}{\Delta} 3,05 \cdot r$	0	0	0
	-1	$-\frac{1}{\Delta} 0,05 \cdot r$	0	0	0	$\frac{1}{\Delta} 25,6 \cdot r$	0	0
	-2	0	$-\frac{1}{\Delta} 0,07 \cdot r$	0	0	0	$-\frac{1}{\Delta} 8,3 \cdot r$	0
	-3	0	0	0	0	0	0	0

Оператор дипольного момента иона вдоль оси z выражается через операторы Стивенса:

$$D_z = x_1 O_{20} + x_2 O_{40} + x_3 O_{60} + x_4 O_{44} + x_5 O_{64}. \quad (67)$$

Коэффициенты перед операторами находим из сравнения матриц возмущения (Таблица 3) и дипольного момента (67).

Построим матрицу дипольного момента (67) на $4f$ волновых функциях:

Таблица 4. Матрица оператора дипольного момента.

		3	2	1	0	-1	-2	-3
$D_z =$	3	$x_1 15 \cdot \alpha$ $+ x_2 180 \cdot \beta$ $+ x_3 180 \cdot \gamma$	0	0	0	$x_4 \cdot 12 \cdot \sqrt{15}$ $\cdot \beta + x_5 \cdot 3$ $\cdot \sqrt{15} \cdot \gamma$	0	0
	2	0	$-x_2 420 \cdot \beta$ $- x_3 1080$ $\cdot \gamma$	0	0	0	$x_4 \cdot 60 \cdot \beta$ $- x_5 \cdot 360$ $\cdot \gamma$	0
	1	0	0	$-x_1 9 \cdot \alpha$ $+ x_2 60 \cdot \beta$ $+ x_3 2700 \cdot \gamma$	0	0	0	0
	0	0	0	0	$-x_1 12 \cdot \alpha$ $+ x_2 360 \cdot \beta$ $- x_3 3600 \cdot \gamma$	0	0	0
	-1	$x_4 \cdot 12 \cdot \sqrt{15}$ $\cdot \beta + x_5 \cdot 3$ $\cdot \sqrt{15} \cdot \gamma$	0	0	0	$-x_1 9 \cdot \alpha$ $+ x_2 60 \cdot \beta$ $+ x_3 2700 \cdot \gamma$	0	0
	-2	0	$x_4 \cdot 60 \cdot \beta$ $- x_5 \cdot 360$ $\cdot \gamma$	0	0	0	$-x_2 420 \cdot \beta$ $- x_3 1080 \cdot \gamma$	0
	-3	0	0	0	0	0	0	$x_1 15 \cdot \alpha$ $+ x_2 180$ $\cdot \beta$ $+ x_3 180$ $\cdot \gamma$

Сравнивая эту матрицу в Таблице 4 и матрицу в Таблице 3, с учетом условия $\text{Trace}(D_z)=0$, получим систему линейных уравнений на коэффициенты $x_1 \dots x_5$. В результате, оператор эффективного электрического дипольного момента принимает вид

$$D_z = 9,4 \cdot 10^{-5} \cdot O_{20} + 1,4 \cdot 10^{-5} \cdot O_{40} - 2,1 \cdot 10^{-5} \cdot O_{60} - 2,1 \cdot 10^{-6} \cdot O_{44} - 1,7 \cdot 10^{-7} \cdot O_{64}, \quad (68)$$

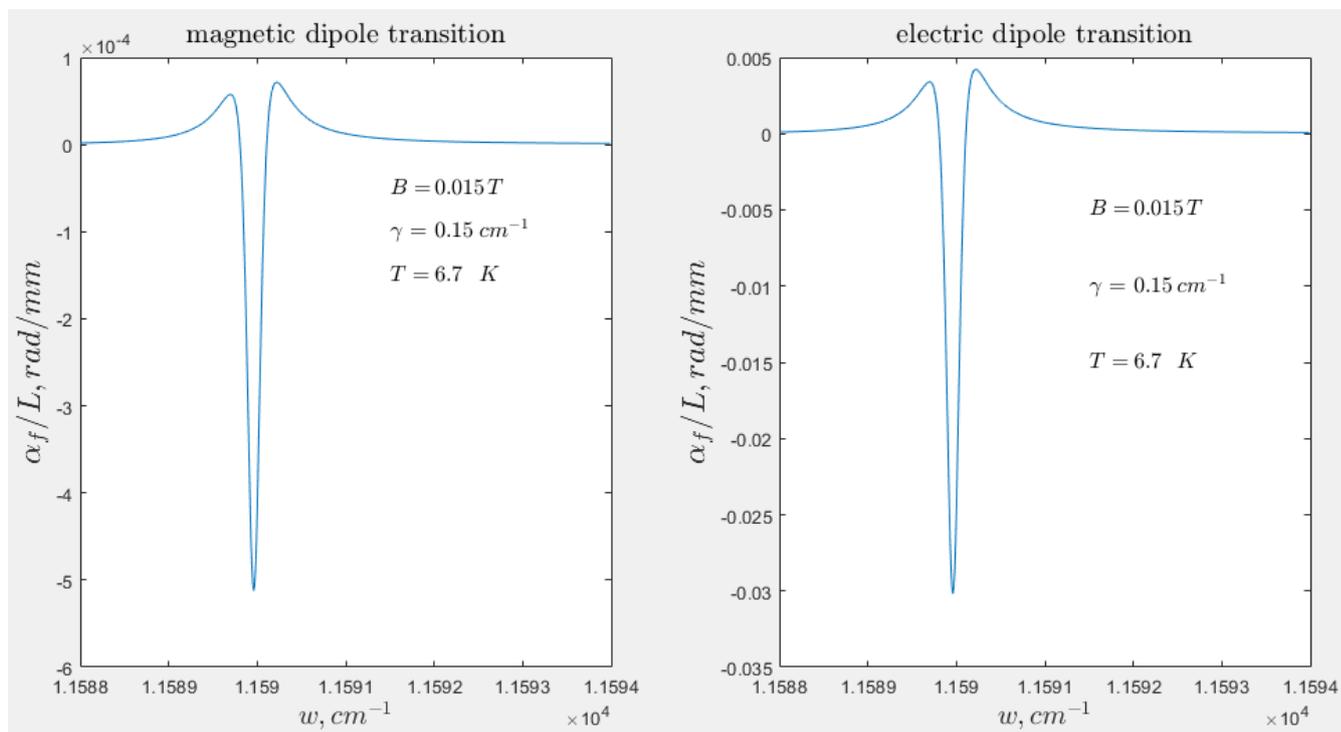
где коэффициенты приведены в зарядовых единицах, умноженных на ангстрем

Глава 3. Зависимость угла поворота плоскости поляризации электромагнитного излучения от частоты при магнитных и электрических дипольных переходах $^4I_{9/2} - ^4F_{3/2}$ в ионах Nd^{3+}

Нами рассмотрена следующая теоретическая модель. На образец, представляющий из себя кристалл CaF_2 , легированный ионами Nd^{3+} , падает плоская электромагнитная волна, направленная вдоль оси z , перпендикулярно поверхности образца. Мы рассматриваем прохождение электромагнитной волны через тетрагональный центр иона неодима в области оптических переходов с основного состояния на нижний подуровни мультиплета $^4F_{3/2}$.

Вначале мы рассчитали величину поворота плоскости поляризации в зависимости от частоты падающего света при магнитных дипольных переходах (рис.4а). Зависимость угла поворота плоскости поляризации от показателя преломления приведена в формуле (25), показатель преломления, в данном случае, зависит от магнитной проницаемости (24а). В формулу для мнимой части магнитной восприимчивости (44) входят матричные элементы, рассчитанные на собственных функциях гамильтониана (46) и энергии рассматриваемых состояний парамагнитного иона. Величина угла поворота плоскости поляризации при магнитных дипольных переходах получилась незначительной (максимальный угол порядка 10^{-4} радиан), было необходимо рассмотреть электрические дипольные переходы.

В случае электрического дипольного перехода величина угла поворота плоскости поляризации зависит от диэлектрической восприимчивости (44а).



Для нахождения мнимой части тензора диэлектрической восприимчивости в случае электромагнитного излучения, распространяющегося вдоль оси z, нужно найти матричные элементы операторов проекций дипольного момента на оси x и y. Данные расчёты проводятся подобно расчёту электрического дипольного момента вдоль оси z, приведённого в §4 второй главы. Как видно на рисунке 4б, величина эффекта при электрическом дипольном переходе имеет существенно большую величину, максимальный угол поворота достигает 0,03 радиан.

Рис 4а. Изменение угла поворота плоскости поляризации при магнитном дипольном переходе.

Рис. 4б. Изменение угла поворота плоскости поляризации при электрическом дипольном переходе.

На рисунке 4 приведены параметры, использованные в расчетах, где B – индукция постоянного магнитного поля, T – температура, при которой

находится образец, и γ – постоянная, определяемая временем жизни электронных состояний.

Так же мы выполнили расчеты частотных зависимостей угла поворота при изменении магнитного поля (рис. 5) и при изменении параметра уширения γ (рис. 6).

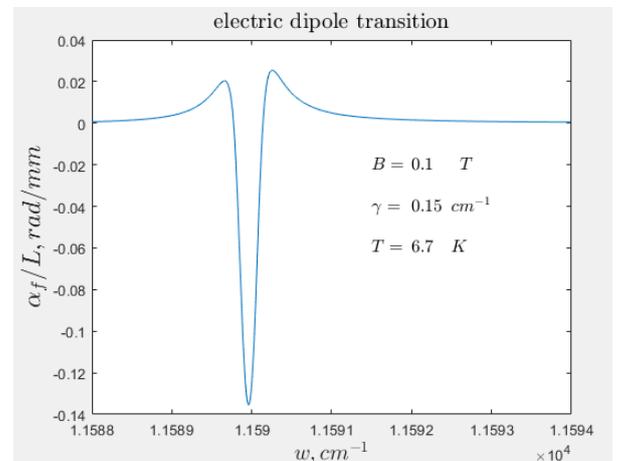
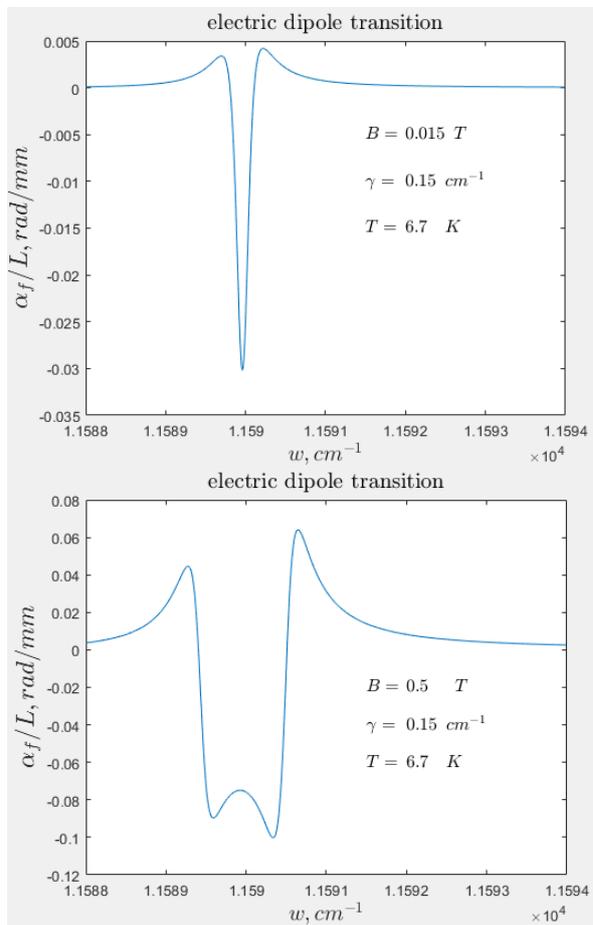


Рис. 5.

Изменение зависимости угла поворота от частоты падающего света при увеличении постоянного магнитного поля.

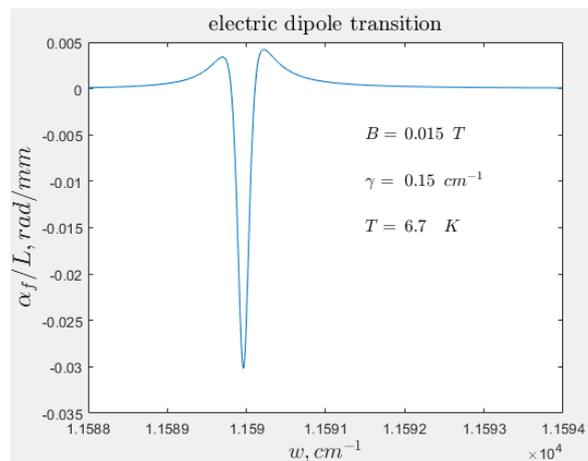
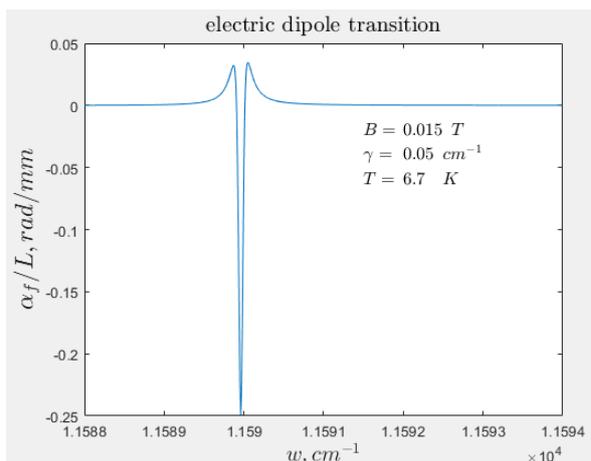
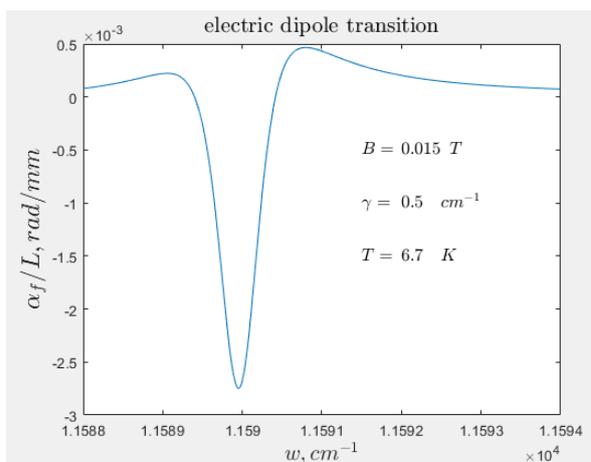


Рис. 6.

Изменение зависимости угла поворота от частоты падающего света при увеличении параметра уширения, отвечающего конечному времени жизни электронных состояний.



Целью нашего теоретического

исследования являлось описание спектров фарадеевского вращения для тетрагонального центра иона Nd^{3+} в кристалле CaF_2 , наблюдаемого в эксперименте. Эксперимент был проведён В. С. Запаским [1] с сотрудниками в СПбГУ. Полученную нами теоретическую кривую зависимости угла поворота плоскости поляризации от частоты падающего света при электрических дипольных переходах можно сопоставить экспериментальным данным (рис.7).

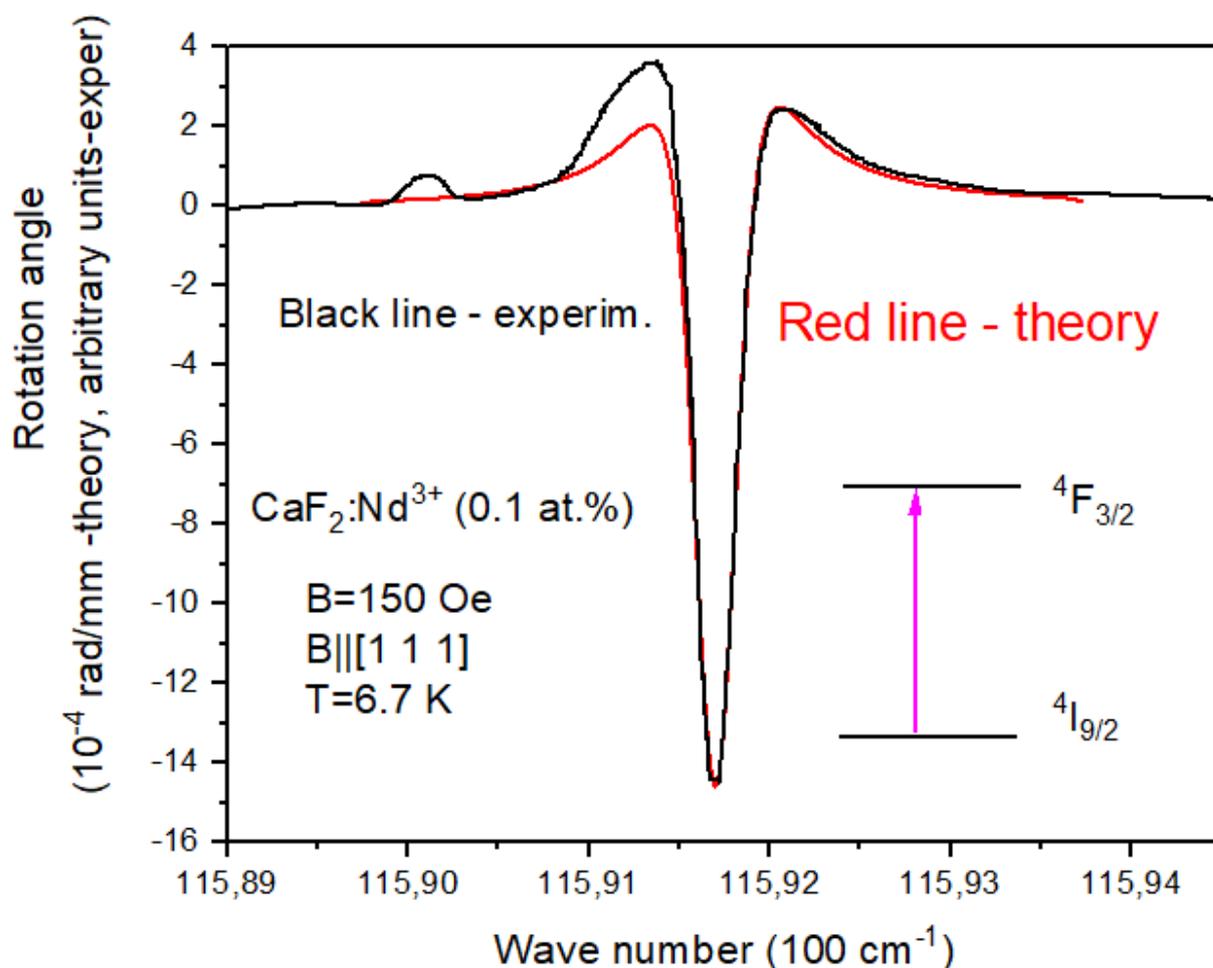


Рис. 7. Зависимость величины угла поворота плоскости поляризации от частоты падающего света при прохождении электромагнитной волны через тетрагональный центр иона Nd^{3+} в кристалле CaF_2 .

На данном графике чёрным цветом представлена экспериментальная зависимость, где угол поворота в произвольных единицах. Внешнее магнитное поле направлено вдоль оси третьего порядка и составляет 150 эрстед, концентрация 0,1%. Минимум зависимости приходится на резонансную частоту перехода с основного состояния на подуровни мультиплетта $4F_{3/2}$, расщепление данных уровней в магнитном поле пренебрежимо, по сравнению с энергией перехода между ними.

Величина эффекта при электрическом дипольном переходе, полученная на эксперименте, меньше экспериментальной примерно в 15 раз. Это допускают приближения, использованных теоретических моделей и так же

тем, что количество тетрагональных центров может быть меньше использованной номинальной концентрации ионов неодима.

Заключение

- ❑ Получены параметры кристаллического поля в рамках модели обменных зарядов для тетрагональных центров ионов Nd^{3+} в кристалле CaF_2 .
- ❑ Построен оператор эффективного электрического дипольного момента ионов неодима в тетрагональных центрах.

- Получено аналитическое выражение для компонент тензоров магнитной и диэлектрической проницаемости.
- Разработан алгоритм расчета угла поворота плоскости поляризации электромагнитного излучения тетрагональными центрами ионов неодима в кристалле CaF_2 в области резонансных оптических переходов в зависимости от температуры, напряженности и ориентации внешнего постоянного магнитного поля в пакете Matlab.

Список литературы

1. Giant spin-noise gain enables magnetic resonance spectroscopy of impurity crystals / A. N. Kamenskii, A. Greilich, I. I. Ryzhov, et al. // Phys. Rev. Res.– 2020. – V.2. – P. 023317(1-6).
2. Б.З. Малкин. Квантовая теория парамагнетизма/ Казань, 2006. – 87 с.

3. Ландау, Л.Д. Электродинамика. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука. – 1982. – Т. 8. – 621 с.
4. P. W. Y. Lung. Faraday rotation of rare earth in crystal/ P. W. Y. Lung. // J. Phys. C: Solid. St. Phys. – 1970. – Vol. 4. – P. 820 – 826.
5. H. A. Kramers. Theorie generale de la rotation paramagnetique dans les cristaux/ Proc. Acad. Sci. Amsterdam. – 1930. – Vol. 33. – P. 959 – 972.
6. Y. R. Shen. Faraday rotation of rare-earth ions. I. Theory* / Y. R. Shen. // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 133. – №. 2A. – P. A511 – A515.
7. Uygun V. Valiev. Magneto-optical Spectroscopy of the Rare-Earth Compounds: Development and Application / U. V. Valiev, J. B. Gruber, G. W. Burdick. – SciRP edition, 2012. – 143 с.
8. Малкин, Б. З. Кристаллическое поле и электрон-фононное взаимодействие в редкоземельных парамагнетиках: Дис. ... доктор. физ.-мат. наук: 18.01.85 – дата защиты – Казань, 1984.
9. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука. – 1982. – Т. – 4. – 621 с.
10. B. Z. Malkin. Crystal field and Electron-Phonon Interaction in Rare-Earth Ionic Paramagnets / Modern Problems in Condensed Matter Sciences. – 1987. – Vol. 21 – P. 13-50.
11. T. P. J. Han. Site-selective spectroscopy of Nd^{3+} centers in $\text{CaF}_2:\text{Nd}^{3+}$ and $\text{SrF}_2:\text{Nd}^{3+}$ / T. P. J. Han, G. D. Jones, R. W. G. Syme // Phys. Rev. B. – 1992. – V.47. - №.22. - P. 14706-14723.
12. Архипов, С.М. Структура и спектр тетрагональных центров в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Ce}^{3+}$ в электрическом поле / С.М Архипов, Б.З. Малкин // ФТТ – 1980. – Т. 22. – С. 1471–1477.
13. R. W. Schwartz. Magnetic circularly polarized emission and magnetic circular dichroism study of the ${}^7\text{F}_J \leftrightarrow {}^5\text{D}_4$ transitions in crystalline $\text{Cs}_2\text{NaTbCl}_6$ / R. W. Schwartz et al. // Mol. Phys., - 1977. – Vol. 34. – P. 361 – 379.