

NdCl₃ 单晶体中 Nd³⁺ 离子的斯塔克子能级的计算

顾英俊 李大芬 连绍仁 宋增福

(北京大学物理系、固体物理所)

处于晶体中的 Nd³⁺ 离子在弱晶场作用下, 它的能级将发生分裂。每一条能级分裂为几条以群的不可约表示为标记的斯塔克(Stark)子能级。通过测量它的吸收光谱和偏振特性以及结合偏振选择定则, 可确定子能级的能量值及相应的不可约表示的标记。

1961年, Carlson 等测量了 Nd³⁺:LaCl₃ 的吸收光谱并定出了 Nd³⁺ 的子能级。Eissenstein 和 Crosswhite 从理论上进行了计算, 得到了子能级的能量值和相应的拟合参量。

我们自己生长了 NdCl₃ 单晶体, 测量了它的近红外和可见区的吸收光谱并对子能级作了相应的归属。

根据我们的实验结果, 我们用不可约张量方法从理论上进行了计算, 得到了一组拟合参量、Nd³⁺ 的子能级能量值以及相应的波函数。另外, 根据计算结果对互相重迭的 ⁴G_{9/2}、²K_{13/2}、⁴G_{11/2}、²K_{15/2} 等的子能级重新进行了归属。

比较 Crosswhite 对 Nd³⁺:LaCl₃ 的计算, 发现两组参量变化较大的是描述组态相互作用的 α 、 β 、 γ 和 T^k 。由此我们认为, 具有相同晶体结构而晶格常数稍有不同的 NdCl₃ 和 LaCl₃ 单晶体, 其晶体场的差异主要影响到 Nd³⁺ 的组态相互作用。

NdCl₃ 的拟合参量值列于下表。

参 量	参量值(cm ⁻¹)	参 量	参量值(cm ⁻¹)
F_2	318.94	B_0^0	176
F_4	47.82	B_0^4	-356
F_6	4.811	B_0^6	-682
ξ_{Af}	878.5	B_0^8	460
α	21.58	M^0	1.97
β	-636.2	M^2	1.1
γ	1600	M^4	0.75
T^2	385	P^2	255
T^3	41.8	P^4	192
T^4	63	P^6	128
T^6	-283		
T^7	383		
T^8	379		