

三角对称下 $3d^3$ 离子 2E 态 g 因子性质研究*

魏 群†

(宝鸡文理学院物理系, 宝鸡 721007)

(2008 年 10 月 7 日收到, 2008 年 11 月 7 日收到修改稿)

采用完全对角化方法, 以尖晶石结构的 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$, $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 和 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 系列晶体为例, 联系晶格局域结构, 对三角对称下 $3d^3$ 离子 2E 态 g 因子性质进行了研究. 研究中考虑了包括自旋与自旋相互作用、自旋与另一轨道相互作用以及轨道与轨道相互作用在内的微小磁相互作用. 对 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 2E 态 g 因子给出了理论解释, 说明了 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系的 $g_{\parallel}(E')$ 应为负值, 并从理论上预测了 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 2E 态 g 因子数值. 研究表明, 微小磁相互作用对 2E 态 g 因子的贡献较大, 在计算中是不可忽略的. 相对于基态 g 因子来说, 2E 态 g 因子随晶格局域结构变化较为敏感.

关键词: 2E 态 g 因子, $3d^3$ 离子, 尖晶石结构, 磁相互作用

PACC: 7510D, 7630F, 7170C, 7170E

1. 引 言

近年来, 微观自旋哈密顿理论得到了很大的发展. 在过渡金属离子掺杂晶体微观局域结构、高压性质以及相变等研究之中得到了广泛的应用^[1-3]. 在过去的研究中, 磁相互作用主要考虑了自旋与轨道(SO)相互作用, Yang 等^[3-5]在前人研究的基础上进一步考虑了包括自旋与自旋(SS)相互作用、自旋与另一轨道(SOO)相互作用以及轨道与轨道(OO)相互作用等微小磁相互作用, 采用完全对角化方法, 对轴对称下过渡金属离子基态自旋哈密顿参量的微观起源进行了系统的研究. 过去的研究工作主要集中在对基态自旋哈密顿参量(包括基态零场分裂和 g 因子)的性质研究上, 对过渡金属掺杂材料的基态自旋哈密顿参量给出了理论解释. 上世纪六七十年代, 一系列的实验对 d^3 离子第一激发态 2E 态 g 因子进行了测量^[6-11], 得到了一些晶体 2E 态 g 因子的实验值. Macfarlane^[12]给出了三角对称下 2E 态 g 因子的微扰计算公式, 但得到的公式非常复杂. 而且从文献[12]表 IV 中给出的计算结果也可以看出, 应用微扰公式计算的结果非常不好. 本文将采用完全对角化

方法, 以尖晶石结构的掺 Cr^{3+} 离子 $ZnAl_2O_4$, $ZnGa_2O_4$ 和 $MgAl_2O_4$ 系列晶体为例, 对三角对称下 d^3 组态离子 2E 态 g 因子的性质进行系统的研究.

2. 计算公式

三角对称下 $3d^3$ 电子体系哈密顿为

$$H = H_{ee}(B, C) + H_{CF}(B_{kq}) + H_M(\zeta_d, M_0, M_2), \quad (1)$$

其中 H_{ee} , H_{CF} , H_M 分别表示静电库仑作用、晶体场作用和磁相互作用. 磁相互作用包括 SO, SS, SOO 和 OO 作用, 相应的矩阵元计算公式参见文献[5, 13]. 参量 B 和 C 为 Racah 静电参量, B_{kq} 为晶场参量, ζ_d 为旋轨耦合参量. M_0 和 M_2 为表征微小磁相互作用的 Mavin 径向积分, 对自由 Cr^{3+} 离子, M_0 和 M_2 的取值为 $M_{0F} = 0.2021 \text{ cm}^{-1}$, $M_{2F} = 0.0159 \text{ cm}^{-1}$. 考虑到 Cr^{3+} 离子在晶体中的共价缩减效应^[12], 通常利用近似关系 $M_0 \approx k^2 M_{0F}$, $M_2 \approx k^2 M_{2F}$ 得到 M_0 和 M_2 的数值, 其中 k 是轨道缩减因子.

$3d^3$ 离子哈密顿矩阵为 120×120 阶矩阵. 根据群论的知识, 三角对称下可以约化为三个小矩阵, 分别为 42×42 阶的 E'' 矩阵、 39×39 阶的 E'_+ 矩阵和

* 陕西省教育厅科学计划项目(批准号: 08JK216), 国防基金(批准号: EP060302)与宝鸡文理学院重点科研基金(批准号: ZK0713)资助的课题.

† E-mail: weiaqun@tom.com

39 × 39 阶的 E'_- 矩阵. 其中 E'_+ 和 E'_- 表示 Kramers 二重态, E'' 包含了 21 个二重简并态. 这样, 完全哈密顿矩阵就包含了 60 个二重简并态. 这些谱项中, ${}^4A_2(F)$ 是基态, 第一激发态为 ${}^2E(G)$. 在三角晶场和磁相互作用共同作用下, 会分裂为两个二重简并态, 即 $E'({}^2E)$ 和 $E''({}^2E)$. 这个过程可由群论表示为

$$E \otimes D^{(3/2)} \rightarrow E \otimes (E' \oplus E'') \rightarrow E' \oplus E'' \quad (2)$$

对 $E'({}^2E)$ 态, g 因子定义为^[12]

$$g_{\parallel} [E'({}^2E)] = 2\{k E'_+ | L_z | E'_+ + g_s E'_+ | S_z | E'_+ \}, \quad (3)$$

$$g_{\perp} [E'({}^2E)] = 2\{k E'_+ | L_x | E'_- + g_s E'_+ | S_x | E'_- \}, \quad (4)$$

其中 $|E'_+$ 和 $|E'_-$ 表示 $|E'_+({}^2E)$ 和 $|E'_-({}^2E)$ 态的全组态混合本征矢. 可以由下式得出:

$$|E'_+({}^2E)\rangle = \sum_{i=1}^{39} a_i \varphi_i, \quad (5)$$

$$|E'_-({}^2E)\rangle = \sum_{j=1}^{39} b_j \varphi_j, \quad (6)$$

其中 a_i 和 b_j 是全组态混合系数, 可以通过对角化完全能量矩阵得出. $|\varphi_i$ 和 $|\varphi_j$ 表示 C'_{3v} 双群的不可约表示基函数. k 是轨道缩减因子, g_s 是自由离子的 g 因子数值, 大小为 2.0023.

对 $E''({}^2E)$ 态, g 因子计算公式可以表示为^[12]

$$g_{\parallel}(E'') = (\gamma_a^2 + \gamma_b^2)^{1/2}, \quad (7)$$

其中

$$\gamma_a = 2 \alpha E'' | kL_z + g_s S_z | \alpha E'' \quad (8)$$

$$\gamma_b = 2 \alpha E'' | kL_z + g_s S_z | \beta E'' \quad (9)$$

$|\alpha E''$ 和 $|\beta E''$ 标记的态是 E'' 矩阵中两部分的线性组合. 根据群论的知识, 可以得到, 对 $E'({}^2E)$ 态, $g_{\perp}(E'') = 0$ ^[9, 12].

3. 尖晶石结构系列晶体 2E 态 g 因子

尖晶石结构晶体具有 AB_2O_4 通式, 在一个 O_h 结构晶胞中包含 8 个原胞. 32 个氧离子紧密排列构成的 C_{3v} 对称环境有 64 个四面体立方 (T_d) 对称阳

离子位和 32 个畸变八面体立方 (D_{3d}) 对称阳离子位. 这些阳离子位中只有 8 个四面体立方对称阳离子 ($8A$) 位和 16 个畸变八面体立方 (D_{3d}) 对称阳离子位 ($16B$) 被阳离子占据. 这 24 个阳离子 ($8A$, $16B$) 和 32 个氧离子构成面心立方晶胞. 对于 $ZnAl_2O_4$ 晶体、 $ZnGa_2O_4$ 晶体和 $MgAl_2O_4$ 晶体, Zn 离子和 Mg 离子占据的是四面体立方对称 (T_d) 阳离子位, 而 Al 离子和 Ga 离子占据的是畸变八面体立方 (D_{3d}) 对称阳离子位. 对 $ZnAl_2O_4$ ($ZnGa_2O_4$, $MgAl_2O_4$) 晶体, 晶格常数分别为 $a_0 = 0.8086$ nm (0.837 nm, 0.808 nm)^[14, 15]. Cr^{3+} 离子掺入这些晶体后将占据 D_{3d} 对称位. 由于 Cr^{3+} 离子半径和 Al^{3+} 离子、 Ga^{3+} 离子半径不同, 因此掺入这些晶体后会引起晶格局域结构的变化, 我们用键角的变化量 $\Delta\theta$ 来表征晶格局域结构的畸变. 这样, 采用叠加模型^[16, 17] 相应的晶场参量 B_{kq} 就表示为

$$B_{20} = 6\bar{A}_2 [3\cos^2(\theta_0 + \Delta\theta) - 1], \quad (10)$$

$$B_{40} = 6\bar{A}_4 [35\cos^4(\theta_0 + \Delta\theta) - 30\cos^2(\theta_0 + \Delta\theta) + 3], \quad (11)$$

$$B_{43} = -12\sqrt{35}\bar{A}_4 \sin^3(\theta_0 + \Delta\theta) \cos(\theta_0 + \Delta\theta), \quad (12)$$

其中 \bar{A}_2 和 \bar{A}_4 是内禀参量, 与中心离子和配体离子的性质有关. 对 $(CrO_6)^{9-}$ 基团通常取为^[18], $\bar{A}_4 = \frac{3}{4}Dq$, $\bar{A}_2 = 10.8\bar{A}_4$. θ_0 为基质晶体的键角, 对 $ZnAl_2O_4$ ($ZnGa_2O_4$, $MgAl_2O_4$) 晶体, θ_0 分别为 49.94° , 50.66° 和 50.66° . 由于基态零场分裂随晶格局域结构的变化非常敏感, 因此可以利用拟合基态零场分裂实验值的方法来确定晶格局域结构. 计算中采用的参量列在表 1 中.

通过大量拟合计算, 可以得到对 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ ($ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$, $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$) 晶体, $\Delta\theta$ 分别为 3.19° , 3.19° 和 2.50° , 即畸变后的键角分别为 53.13° , 53.16° 和 53.85° . 利用 (3)–(9) 式就可以计算出 2E 态 g 因子, 计算时分别考虑了 SO 作用和考

表 1 计算中所用参量表^[14, 19]

晶体	B/cm^{-1}	C/cm^{-1}	D_q/cm^{-1}	ξ_d/cm^{-1}	M_0/cm^{-1}	M_2/cm^{-1}	k	$\theta_0(^\circ)$
$ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$	700	3200	1825	250	0.0802	0.0063	0.63	49.94
$ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$	670	3230	1800	250	0.099	0.0078	0.7	50.66
$MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$	700	3200	1825	250	0.0802	0.0063	0.63	50.66

考虑全部磁相互作用两种情况, 计算结果列在表 2—表 4 中. 表中计算值 (b) 表示只考虑 SO 作用时计算得到的结果, 计算值 (c) 表示考虑全部磁相互作用时计算得到的结果. 从表 2 可以看到, 计算值与实验值可以较好地符合, 从而联系晶体结构, 统一解释了 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系基态和第一激发态的 g 因子. 在表 3 中给出了文献 [14] 中对 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 $^2 E$ 态 g 因子的计算值, 对比我们的计算结果发现, 对 $g_{\perp}(E')$ 和 $g_{\parallel}(E'')$ 的计算结果符合得很好, 但 $g_{\parallel}(E')$ 的计算结果大小符合很好, 符号却相反. 为进一步验证结果的符号, 我们采用文献 [14] 中给出的参量进行了计算, 得到结果为 -0.95 . 从而可以证实, 文献 [14] 中只给出了 $g_{\parallel}(E')$ 的大小, 没有给出 $g_{\parallel}(E')$ 的符号. 这里我们计算的结果表明 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系的 $g_{\parallel}(E')$ 应为负值. 对比表 2 和表 4 中对 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系和 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 $g_{\parallel}(E')$ 的计算结果可以认为这一推断是合理的. 我们没有查到 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 $^2 E$ 态 g 因子的实验数据或是其他理论数据, 所以基于前面对结构类似的 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系和 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 $^2 E$ 态 g 因子的计算, 我们对 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系 $^2 E$ 态 g 因子进行了理论预测, 结果列在表 4 中, 这些结果有待于相应的实验做进一步的验证.

如果令 $\zeta_d = M_0 = M_2 = 0$ 则 $H_M = 0$ 我们发现, 这时 $g_{\parallel}(^4 A_2)$, $g_{\perp}(^4 A_2)$, $g_{\parallel}(E')$ 和 $g_{\parallel}(E'')$ 的值不为零, 相应的计算结果列在表 2—表 4 的计算值 (a)

中. 这样, 我们就不能直接用表 2—表 4 中 $g_{\parallel}(E')$ 和 $g_{\parallel}(E'')$ 的值来讨论磁相互作用的贡献. 为了讨论 SS, SOO 和 OO 相互作用的贡献, 我们定义 $H_M = 0$ 和 $H_M \neq 0$ 两种情况下计算值之差表示磁相互作用的贡献, 即

$$\Delta X = X_{H_M \neq 0} - X_{H_M = 0}, \quad (13)$$

式中 X 代表 D , $g_{\parallel}(^4 A_2)$, $g_{\perp}(^4 A_2)$, $g_{\parallel}(E')$, $g_{\perp}(E')$ 或 $g_{\parallel}(E'')$. 显然, 满足 $\Delta D = D$ 和 $\Delta g_{\perp}(E') = g_{\perp}(E')$. 同时定义比值 η_X 表征来自于 SS, SOO 和 OO 相互作用的贡献与 SO 作用的相对大小, 即

$$\eta_X = \left| \frac{\Delta X_{\text{Total}} - \Delta X_{\text{SO}}}{\Delta X_{\text{SO}}} \right|, \quad (14)$$

下标 'Total' 表示 ΔX 是在考虑了全部磁相互作用的情况下计算出来的. η_X 越大, 则表明来自于 SS, SOO 和 OO 相互作用的贡献越大. 基态和第一激发态零场分裂和 g 因子的 η_X 值的计算结果列在表 2—表 4 中. 从计算结果可以看出, 微小磁相互作用对基态零场分裂的贡献是不可忽略的, 但对基态 g 因子贡献较小. 对 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系和 $MgAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系, 微小磁相互作用对 $g_{\parallel}(E')$ 和 $g_{\perp}(E')$ 的贡献较小, 但对 $g_{\parallel}(E'')$ 的贡献较大. 相应的 η 值分别为 0.365 和 0.386. 对 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系来说, 微小磁相互作用对 $g_{\parallel}(E')$ 也有较大贡献, 计算得到的 η 值为 0.296, 而对 $g_{\parallel}(E'')$ 的贡献达到了与来自于 SO 的贡献大小相当的程度, 计算得到的 η 值为 0.984.

表 2 $ZnAl_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系基态零场分裂和 g 因子以及 $^2 E$ 态 g 因子 (D 的单位为 cm^{-1})

	D	$g_{\parallel}(^4 A_2)$	$g_{\perp}(^4 A_2)$	$g_{\parallel}(E')$	$g_{\perp}(E')$	$g_{\parallel}(E'')$
计算值 (a)	0	2.0023	2.0023	-1.20029	0	2.80431
计算值 (b)	0.86071	1.98259	1.97692	-1.36704	0.06050	2.87797
计算值 (c)	0.93061	1.98332	1.97785	-1.37419	0.05807	2.90483
实验值 [11, 49]	0.9278	1.9807 ± 0.0001	1.9774 ± 0.0001	0 ± 0.15	0 ± 0.15	1.85 ± 0.05
η	0.081	0.037	0.037	0.043	0.040	0.365

(a) 不考虑磁相互作用, 即 $H_M = 0$ 的情况下计算得到的结果 (b) 只考虑 SO 作用时计算得到的结果 (c) 考虑全部磁相互作用时计算得到的结果.

表 3 $ZnGa_2O_4 : Cr^{3+}$ 体系基态零场分裂和 g 因子以及 $^2 E$ 态 g 因子 (D 的单位为 cm^{-1})

	D	$g_{\parallel}(^4 A_2)$	$g_{\perp}(^4 A_2)$	$g_{\parallel}(E')$	$g_{\perp}(E')$	$g_{\parallel}(E'')$
计算值 (a)	0	2.0023	2.0023	-1.14981	0	2.85479
计算值 (b)	0.47634	1.97818	1.97469	-1.19299	0.10459	2.82591
计算值 (c)	0.52335	1.97928	1.97594	-1.20576	0.09960	2.85434
文献 [14] 计算				0.95	0.15	2.23
实验值 [14]	0.524	1.9774 ± 0.0005	1.9761 ± 0.0005			
η	0.099	0.046	0.045	0.296	0.048	0.984

(a) 不考虑磁相互作用即 $H_M = 0$ 的情况下计算得到的结果 (b) 只考虑 SO 作用时计算得到的结果 (c) 考虑全部磁相互作用时计算得到的结果.

表 4 MgAl₂O₄:Cr³⁺ 体系基态零场分裂和 *g* 因子以及²E态 *g* 因子 (*D* 的单位为 cm⁻¹)

	<i>D</i>	<i>g</i> (⁴ A ₂)	<i>g</i> _⊥ (⁴ A ₂)	<i>g</i> (<i>E'</i>)	<i>g</i> _⊥ (<i>E'</i>)	<i>g</i> (<i>E''</i>)
计算值(a)	0	2.0023	2.0023	-1.18831	0	2.81629
计算值(b)	0.8445	1.98252	1.97696	-1.35039	0.06178	2.88510
计算值(c)	0.9130	1.98325	1.97788	-1.35763	0.05932	2.91169
实验值 ^[19]	0.915 ± 0.002	1.985	1.983			
<i>η</i>	0.081	0.037	0.036	0.045	0.040	0.386

(a) 不考虑磁相互作用即 *H*_M = 0 的情况下计算得到的结果 (b) 只考虑 SO 作用时计算得到的结果 (c) 考虑全部磁相互作用时计算得到的结果.

4. ²E态 *g* 因子与晶体结构之间的关系

为了研究²E态 *g* 因子与晶体结构之间的关系, 我们使键角变化 52°—54.7° 的范围, 间隔 0.1° 取一个数据点, 分别计算了 *g*_{||}(*E'*), *g*_⊥(*E'*) 和 *g*_{||}(*E''*) 数值, 由这些数值绘制出²E态 *g* 因子随键角变化曲线如图 1—图 3 所示. 为便于和基态 *g* 因子进行比较, 我们同时计算了基态 *g* 因子随键角变化曲线如图 4 和图 5 所示. 从这些图中可以看出, 对 ZnAl₂O₄:Cr³⁺ 体系来说, *g*_{||}(*E'*) 和 *g*_{||}(*E''*) 随键角是非线性变化的, 而 *g*_⊥(*E'*) 在这一范围内是随键角近似线性变化的, 基态 *g* 因子在这一范围内也是近似线性变化的. 为了进一步研究²E态 *g* 因子随键角变化的敏感程度, 我们用每变化 1° 的键角得到的 *g* 因子数值的改变量的平均值来表征这个敏感程度, 这里我们用 *σ* 表示, 即

$$\sigma = \frac{1}{\Delta\theta} \sum_{i=1}^{\Delta\theta/\delta\theta} \left| \frac{\delta_i g}{\delta\theta} \right|, \quad (15)$$

其中, *δθ* 为计算所取的一个小的键角变化单元, 这里我们取 *δθ* = 0.01°. *δ_ig* 为键角变化第 *i* 个 *δθ* 时对应的 *g* 因子的变化量. *Δθ* 为键角变化区间范围, 这

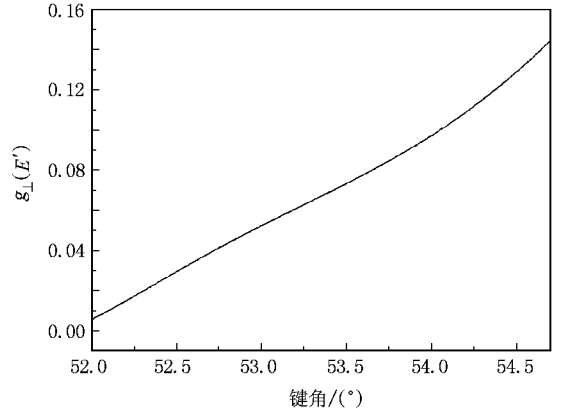


图 2 ZnAl₂O₄:Cr³⁺ 体系 *g*_⊥(*E'*) 随键角的变化曲线

里键角变化范围为 52°—54.7°, 所以 *Δθ* = 2.7°. 计算结果列在表 5 中. 从计算结果可以看出, 相对基态 *g* 因子来说, ²E态 *g* 因子随晶格结构变化较为敏感, 因此, 在讨论晶格局域结构时, ²E态 *g* 因子的计算值也有一定参考价值.

表 5 基态和²E态 *g* 因子随键角变化敏感程度 (单位: (°)⁻¹)

	<i>g</i> (⁴ A ₂)	<i>g</i> _⊥ (⁴ A ₂)	<i>g</i> (<i>E'</i>)	<i>g</i> _⊥ (<i>E'</i>)	<i>g</i> (<i>E''</i>)
<i>σ</i>	0.0023	0.0011	0.7088	0.0515	0.7996

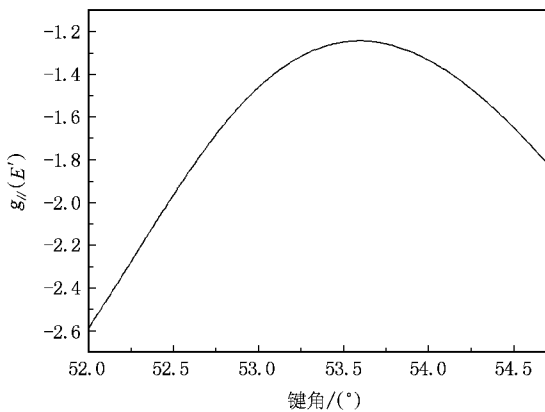


图 1 ZnAl₂O₄:Cr³⁺ 体系 *g*_{||}(*E'*) 随键角的变化曲线

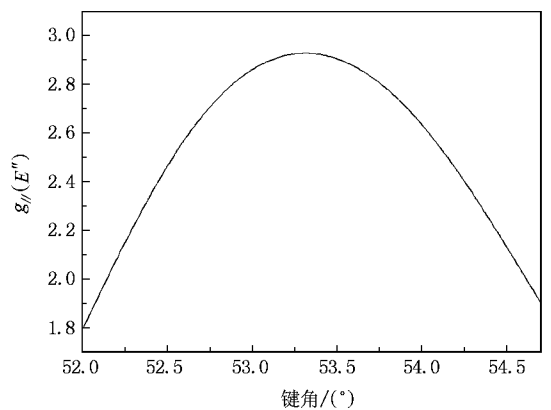
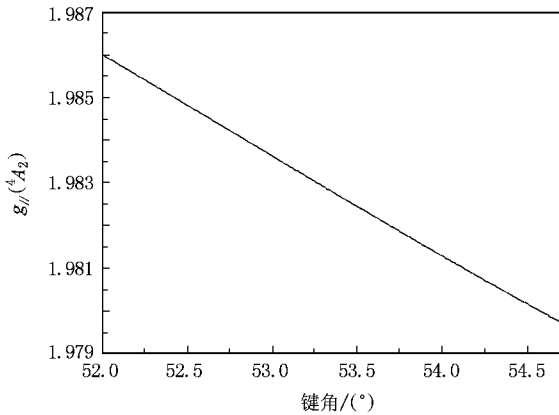
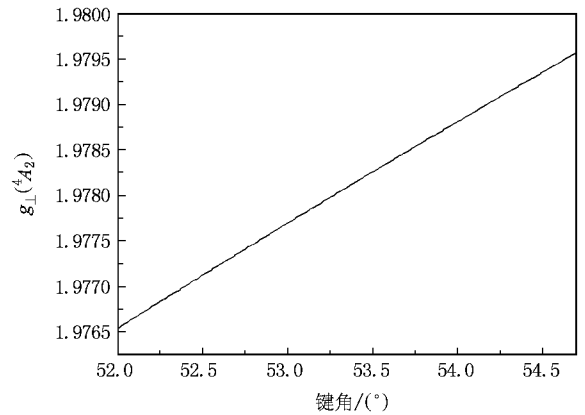


图 3 ZnAl₂O₄:Cr³⁺ 体系 *g*_{||}(*E''*) 随键角的变化曲线

图4 $\text{ZnAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$ 体系 $g_{\parallel}(^4A_2)$ 随键角的变化曲线图5 $\text{ZnAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$ 体系 $g_{\perp}(^4A_2)$ 随键角的变化曲线

5. 结 论

通过对尖晶石结构的 $\text{ZnAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$, $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$ 和 $\text{MgAl}_2\text{O}_4:\text{Cr}^{3+}$ 系列晶体 2E 态 g 因子的讨论, 研究了三角对称下 2E 态 g 因子的性质. 结果表明, 在磁相互作用中, 2E 态 g 因子主要来自于 SO 作用的贡献. 但与基态 g 因子不同, 对 2E 态 g 因子来说, 微小磁相互作用(包括 SS, SOO 和 OO 作用)对其有

较大贡献, 尤其是对 $g_{\parallel}(E'')$ 的贡献都达到了 20% 以上, 因此在研究中是不可忽略的. 为了研究 2E 态 g 因子与晶格局域结构的关系, 我们计算得到了基态和 2E 态 g 因子随键角变化关系曲线. 从这些曲线可以看出, $g_{\parallel}(E')$ 和 $g_{\parallel}(E'')$ 随键角是非线性变化的, 而 $g_{\perp}(E')$ 在这一范围内是随键角近似线性变化的. 进一步的计算表明, 相对于基态 g 因子来说, 2E 态 g 因子随晶格局域结构的变化较为敏感.

- [1] Dong H N, Wu X X, Wu S Y, Zheng W C 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 616 (in Chinese) [董会宁、吴晓轩、邬劭轶、郑文琛 2002 物理学报 **51** 616]
- [2] Yang L, Yin C H, Jiao Y, Zhang L, Song N, Ru R P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1991 (in Chinese) [杨柳、殷春浩、焦杨、张雷、宋宁、茹瑞鹏 2006 物理学报 **55** 1991]
- [3] Yang Z Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4512 (in Chinese) [杨子元 2008 物理学报 **57** 4512]
- [4] Yang Z Y 2007 *J. Lumin.* **126** 753
- [5] Hao Y, Yang Z Y 2006 *J. Magn. Magn. Mater.* **299** 445
- [6] Imbusch G F, Chinn S R, Geschwind S 1967 *Phys. Rev.* **161** 295
- [7] Wood D L 1965 *J. Chem. Phys.* **42** 3404
- [8] Chase L L 1968 *Phys. Rev.* **168** 341
- [9] Crozier M H 1965 *Phys. Lett.* **18** 219

- [10] Sugano S, Tanabe Y 1958 *J. Phys. Soc. Jpn.* **13** 880
- [11] Wood D L, Burke W E, Van Uitert L G 1969 *J. Chem. Phys.* **51** 1966
- [12] Macfarlane R M 1970 *Phys. Rev. B* **1** 989
- [13] Rudowicz C, Yang Z Y, Yeung Y Y, Qin J 2003 *J. Phys. Chem. Solids* **64** 1419
- [14] Kahan H M, Macfarlane R M 1971 *J. Chem. Phys.* **54** 5197
- [15] Wang H, Kuang X Y, Mao A J, Yang X 2007 *Chem. Phys. Lett.* **436** 149
- [16] Newman D J, Ng B 1989 *Rep. Prog. Phys.* **52** 699
- [17] Rudowicz C 1987 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **20** 6033
- [18] Yang Z Y, Rudowicz C, Qin J 2002 *Physica B* **318** 188
- [19] Wood D L, Imbusch G F, Macfarlane R M, Kisliuk P, Larkin D M 1968 *J. Chem. Phys.* **48** 5255

On the g factors of 2E state for $3d^3$ ions at trigonal symmetry^{*}

Wei Qun[†]

(Department of Physics , Baoji University of Arts and Science , Baoji 721007 , China)

(Received 7 October 2008 ; revised manuscript received 7 November 2008)

Abstract

In connection with local structure , the g factors of 2E state are studied by using complete diagonalization method (CDM) , with the spinel type crystals $\text{ZnAl}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$, $\text{ZnGa}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$ and $\text{MgAl}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$ as the cases . The slight magnetic interactions , including spin-spin (SS) , spin-other-orbit (SOO) and orbit-orbit (OO) interactions are taken into account in our investigations . Theoretical explanations of g factors of 2E state for $\text{ZnAl}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$ have been given . The results show that the sign of g_{\parallel} (E') for $\text{ZnGa}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$ should be negative . And the value of g factors of 2E state for $\text{MgAl}_2\text{O}_4 \cdot \text{Cr}^{3+}$ have been predicted . It is shown that , the contributions to g factors of 2E state from slight magnetic interactions are appreciable . Compared with the g factors of ground state , the g factors of 2E state are sensitive to the local structure .

Keywords : g factors of 2E state , $3d^3$ ions , spinel crystals , magnetic interaction

PACC : 7510D , 7630F , 7170C , 7170E

^{*} Project supported by the Science Foundation of the Education Department of Shaanxi Province , China (Grant No. 08JK216) , the National Defense Foundation (Grant No. EP060302) and the Key Research Foundation of Baoji University of Arts and Science (Grant No. ZK0713) .

[†] E-mail : weiaqun@tom.com