

红宝石晶体的基态能级分裂及 Jahn-Teller 效应*

殷春浩^{1)†} 张 雷¹⁾ 赵纪平²⁾ 焦 杨¹⁾ 宋 宁¹⁾ 茹瑞鹏¹⁾ 杨 柳¹⁾

1) 中国矿业大学理学院, 徐州 221008)

2) 徐州师范大学物理系, 徐州 221009)

(2006 年 3 月 24 日收到, 2006 年 6 月 4 日收到修改稿)

应用不可约张量方法和群的理论构造了三角对称晶场中考虑自旋-轨道相互作用, 自旋-自旋相互作用的 $3d^3/3d^7$ 离子的可完全对角化的 120 阶微扰哈密顿矩阵, 利用该矩阵计算了红宝石晶体的基态能级、零场分裂参量和 Jahn-Teller 效应, 研究了自旋-轨道的自旋二重态对基态能级的贡献, 证明其二重态对基态能级的贡献是不可忽略的, 理论计算值与实验值相符合. 在此基础上, 进一步研究了自旋-自旋相互作用对红宝石晶体的光谱精细结构和零场分裂参量的影响, 发现自旋-自旋相互作用对零场分裂参量的影响是不可忽略的.

关键词: 基态能级, 精细结构, 自旋-轨道相互作用, 零场分裂

PACC: 7170C, 7630F

1. 引 言

红宝石($\text{Cr}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$)晶体是一种重要的激光材料, 由于它在激光中具有重要的应用, 国内外很多学者都对其进行了研究. 在红宝石晶体材料中, 当 Cr^{3+} 掺入基质晶体后, 它将替代基质中的 Al^{3+} , 激活离子 Cr^{3+} 被位于畸变八面体顶点上的六个 O^{2-} 配体包围, 属于 C_3 点群对称^[1], 由于红宝石晶体的畸变角非常小($\phi = 2.15^\circ$)^[2], 通常按 C_{3v} 作近似处理^[3]. 近年来, 学者们对红宝石晶体的光谱精细结构, 电子顺磁共振参量等方面的研究做了大量的工作, 如杨等人研究了红宝石的 g 因子的计算^[4], 自旋-自旋相互作用以及自旋-其他轨道相互作用对电子顺磁共振 g 因子的影响等问题^[1], 但至今尚未见有关讨论自旋二重态对基态能级贡献的大小以及晶体中的 Jahn-Teller 效应(J-T 效应)的报道. 究其原因, 是其基态不固定, 在自旋-轨道的相互作用下, 基态和激发态之间的耦合关系比较复杂造成的. 晶体物质中的 J-T 效应的存在是近年来有关研究者新发现的一个前沿问题, 它反映了电子自旋和它所处的环境发生畸变的复杂过程的结果, 对这种过程的理解有利于研究者深刻理解晶体物质的光谱特性. 本文首先应

用不可约张量方法和群的理论构造了一个在三角对称晶场中考虑自旋-轨道相互作用、自旋-自旋相互作用的 $3d^3/3d^7$ 离子的可完全对角化的 120 阶微扰哈密顿矩阵. 在考虑了自旋-自旋相互作用和 Trees 修正的基础上, 按照近年来被广大研究者广泛采用的完全对角化方法^[5-10], 利用国际上较为流行的科学计算软件 Matlab 设计了完全对角化的计算程序, 计算了红宝石晶体基态的能级、零场分裂参量, 在此基础上进一步研究了 $\text{Cr}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$ 晶体由立方对称晶场向三角对称晶场畸变和自旋-轨道联合作用引起的 J-T 效应^[11]以及自旋二重态对晶体光谱基态能级的影响, 其理论计算值和实验值相符合.

2. 理 论

2.1. 体系的哈密顿量与矩阵元的计算

如前所述, Cr^{3+} 离子在 Al_2O_3 晶体中近似处于 C_{3v} 点群对称晶场中, 研究 $\text{Cr}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$ 光谱精细结构和基态零场分裂(zero field splitting, ZFS)所需要的哈密顿量为

$$H = H_E(B, C) + H_{\text{CF}}(B_{20}, B_{40}, B_{43}) + H_{\text{SO}}(\xi) + H_{\text{Trees}}(\alpha) + H_{\text{SS}}(M_0, M_2), \quad (1)$$

* 国家教育部留学回国人员实验室建设及科研经费(批准号: 2003.18); 中国矿业大学创新团队项目(批准号: 2004ZCX012)资助的课题.

† E-mail: chunhaoyin@sohu.com

其中 H_E 为静电库仑相互作用哈密顿量, H_{CF} 为周围环境对离子产生的晶场势哈密顿量, H_{SO} 为自旋-轨道相互作用哈密顿量, H_{Trees} 为 Trees 修正哈密顿量, H_{SS} 为自旋-自旋相互作用哈密顿量.

采用中间场^[12]基函数 $|l^N \alpha SLJM_J\rangle$, 利用 Racah 不可约张量算符法, 可构造一个 120 阶的可完全对角化的哈密顿矩阵.

其中静电矩阵元表示为^[13-15]

$$d^{3/7} \alpha SLJM_J |H_E| d^{3/7} \alpha' S' L' J' M'_J \\ = E(\alpha \alpha' SL) \delta_{SLJM_J, S' L' J' M'_J}, \quad (2)$$

$$E(\alpha \alpha' SL) = \sum_{k=0, 2, \dots, 2l} F_{(nl)}^{(k)} f_k(l^N \alpha \alpha' SL).$$

积分值 $F_{(nl)}^{(k)}$ 只取决于径向波函数 $f_k(l^N \alpha \alpha' SL)$ 与光谱项有关. 对 d 电子通常令 $F^0 = A + (7/5)C$, $F^2 = 49B + C$, $F^4 = (441/35)C$. A 参量在计算能级时会被自然消去, B 和 C 是 Racah 参量.

晶场矩阵元表示为^[13-15]

$$d^{3/7} \alpha SLJM_J |H_{CF}| d^{3/7} \alpha' S' L' J' M'_J \\ = \sum_{kq} (-1)^{J-M_J+S+L+k} [(2J+1)(2J'+1)]^{1/2} \\ \times \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M'_J \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J' & k & J \\ L & S & L' \end{Bmatrix} l \parallel C^{(k)} \parallel l \\ \times l^N \alpha SL \parallel U^{(k)} \parallel l^N \alpha' S' L' B_{kq} \delta_{S, S'}. \quad (3)$$

自旋-轨道相互作用矩阵元表示为^[13-15]

$$d^{3/7} \alpha SLJM_J |H_{SO}| d^{3/7} \alpha' S' L' J' M'_J \\ = \xi [(L+1)(2l+1)]^{1/2} (-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ S' & L' & 1 \end{Bmatrix} \\ \times l^N \alpha SL \parallel V^{(11)} \parallel l^N \alpha' S' L' \delta_{JM_J, J' M'_J}, \quad (4)$$

其中 $\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \end{pmatrix}$ 为 3j 符号, $\begin{Bmatrix} \dots \\ \dots \end{Bmatrix}$ 为 6j 符号, 在实际构造矩阵过程中, 可以将 $3nj$ 符号的计算函数化^[16], B_{kq} 为晶场参量, 对于三角对称晶场中的 $3d^3/3d^7$ 态离子有 B_{20} , B_{40} , B_{43} 三个晶场参量, ξ 为自旋-轨道相互作用参量, 约化矩阵元 $l^N \alpha SL \parallel U^{(k)} \parallel l^N \alpha' S' L'$ 和 $l^N \alpha SL \parallel V^{(11)} \parallel l^N \alpha' S' L'$ 可在文献^[13-15] 中查得.

当考虑不同电子的轨道的相互作用时, 可以在相应的光谱项 ^{2S+1}L 的对角静电矩阵元上加上 Trees 修正项^[13-15]:

$$E(\alpha) = \alpha L(L+1), \quad (5)$$

其中 α 为 Trees 修正参量.

自旋-自旋相互作用矩阵元表示为^[17,18]

$$d^{3/7} \alpha SLJM_J |H_{SS}| d^{3/7} \alpha' S' L' J' M'_J$$

$$= (-1)^{S+L-J} W(SLS'L'; J2)$$

$$\times d^{3/7} \alpha SL \parallel T^{(22)} \parallel d^{3/7} \alpha' S' L' \quad (6)$$

约化矩阵元 $d^{3/7} \alpha SL \parallel T^{(22)} \parallel d^{3/7} \alpha' S' L'$ 以自旋-自旋相互作用参量 M_0 和 M_2 的表达式给出^[17,18]. 其中

$$W(SLSL; J2)$$

$$= (-1)^{S+L-J} 2 \left\{ \frac{(2S-2)(2L-2)!}{(2S+3)(2L+3)!} \right\}^{1/2}$$

$$\times [3K(K+1) - 4L(L+1)S(S+1)],$$

此处 $K = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$.

利用(2)-(6)式可计算出以 $|l^N \alpha SLJM_J\rangle$ 为基函数的 $3d^3/3d^7$ 态离子在三角对称晶场中的相应哈密顿量 $H_E, H_{CF}, H_{SO}, H_{Trees}, H_{SS}$ 的全部矩阵元, 由此构造出一个三角对称(C_{3v})考虑自旋-轨道相互作用、自旋-自旋相互作用的 $3d^3/3d^7$ 离子的可完全对角化的 120 阶微扰哈密顿矩阵. 根据群的理论, 该矩阵可约化为两个 E 表示下的(39×39)阶和一个 B 表示下的(42×42)阶的矩阵^[15]. 在无外磁场的作用下, 两个 E 表示下的(39×39)的矩阵的本征值是完全简并的. 对角化这三个能量矩阵, 可获得 $3d^3/3d^7$ 态离子在三角对称晶场中的相应能量本征值, 即可求出相应的光谱能级的精细结构.

2.2. 零场分裂参量的计算

对于自由 Cr^{3+} 离子, 其基态项为 4F , 在 O_h 立方对称晶场的作用下, 4F 态分裂为 $^4T_{1g}, ^4T_{2g}, ^4A_{2g}$ 三个态, 其中 $^4A_{2g}$ 是能量最低的基态. 在三角对称晶场(C_{3v}, D_3, D_{3d})作用下, 能级发生分裂: $^4A_{2g} \rightarrow ^4A_2, ^4T_{1g} \rightarrow ^4T_1 + ^4T_1, ^4T_{2g} \rightarrow ^4T_2 + ^4T_2$. 在自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用下, 谱线进一步分裂为 E, B 表示的 14 条谱线, 其能级分裂如图 1 所示. 其中由 $^4A_{2g}$ 分裂得到的 4A_2 是基态. 按照微观自旋哈密顿方法, 在外磁场 $H=0$ 时, 零场分裂参量 D 与 4A_2 态在三角晶场中能级分裂之间具有如下的关系:

$$D = \frac{1}{2}(B - E), \quad (7)$$

其中 B 和 E 分别是 $B(42 \times 42)$ 与 $E(39 \times 39)$ (E_+ 与 E_- 在零场下能级简并) 矩阵对角化后的最低能级, 这些值可从对角化能量矩阵中获得^[19].

3. 计算结果和讨论

3.1. 光谱精细结构和零场分裂参量的计算

上述构造的三角对称 $3d^3/3d^7$ 离子的可完全对

由计算值 a) 和计算值 b) 比较可知, 在三角场对称下, 在自旋-轨道相互作用下, 三角晶场中的能级进一步发生劈裂. 基态 $^4A_2-0\text{cm}^{-1}$ 分裂为二条, 激发态 $^4T_1-18000\text{cm}^{-1}$ 分裂为四条, $^4T_1-18328\text{cm}^{-1}$ 分裂为二条, $^4T_2-24101\text{cm}^{-1}$ 分裂为四条, $^4T_2-25043\text{cm}^{-1}$ 分裂为二条. 说明自旋-轨道相互作用是引起晶场中光谱能级进一步分裂的重要原因. 计算值 b) 与计算值 c) 进一步比较, 可以看到, 加上自旋-自旋相互作用后, 能级发生了很小的变化. 谱线没有发生进一步的分裂, 只是发生了谱线的平移, 其最大的相对平移为 22.8%. 这个值只反映自旋四重态的自旋-自旋相互作用对基态能级的最大相对贡献. 此外, 在无自旋-轨道相互作用时, 零场分裂参量 D 为 0cm^{-1} , 有自旋-轨道相互作用时, 零场分裂参量 D 为 -0.0344cm^{-1} , 它反映自旋四重态的自旋-轨道相互作用对零场分裂的贡献, 其相对贡献为 18.0%. 仅考虑自旋四重态的自旋-自旋相互作用对零场分裂的贡献较大, 在这种情况下其对零场分裂的相对贡献为 22.8%. 综上所述, 说明自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用是引起基态零场分裂的主要原因.

由计算值 b) 和计算值 d) 比较可以得到在没有考虑自旋-自旋相互作用下, 自旋二重态的自旋-轨道相互作用对基态能级的影响. 它不能使基态谱线发生新的分裂, 只是使谱线发生平移, 这种平移使谱线更加趋近实验值. 其最大相对平移为 59.2%. 同样, 自旋二重态的自旋-轨道相互作用对零场分裂的影响也是较大的. 其相对变化量也为 59.2%.

比较计算值 c) 和计算值 e) 可知, 在考虑自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用时, 自旋二重态对基态能级也有一定的影响, 它不会引起能级发生新的分裂, 但可以造成能级的移动, 最大相对移动为 59.2%. 通过前面计算值 b) 和计算值 d) 的比较知道, 在没有考虑自旋-自旋相互作用下, 自旋-轨道相互作用的自旋二重态使谱线发生的最大相对平移也为 59.2%, 两者数值相等. 这表明自旋-自旋相互作用的自旋二重态对基态能级并没有产生影响. 同样, 在考虑了自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用时的自旋二重态对零场分裂参量的相对贡献为 59.2%, 再减去自旋-轨道相互作用对零场分裂参量的贡献 59.2%, 其差值为 0. 也就是说, 考虑自旋二重态的自旋-自旋相互作用与不考虑自旋二重态的自旋-自旋相互作用对于零场分裂参量 D 的相对贡

献都为 59.2%, 这就说明, 自旋二重态的自旋-自旋相互作用对零场分裂参量没有贡献.

3.2. J-T 效应

将上述三角对称 $3d^3/3d^7$ 离子可完全对角化矩阵应用关系

$$B_{20} = 0, B_{40}^{\text{cubic}} = -227743\text{cm}^{-1},$$

$$B_{43}^{\text{cubic}} = -\sqrt{10/7}B_{40}^{\text{cubic}},$$

退化为立方 (O_h) 对称可完全对角化矩阵, 不考虑自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用, 将上述得到的参量和 $B = 650\text{cm}^{-1}$, $C = 3120\text{cm}^{-1}$, $\alpha = 70\text{cm}^{-1}$ 代入立方对称 (O_h) 的可完全对角化矩阵进行对角化计算得到立方对称 (O_h) 下的三条谱线, 即 $^4A_{2g}$, $^4T_{1g}$, $^4T_{2g}$. 然后, 由相同的方法, 在考虑到自旋-轨道相互作用参量为 $\xi = 180\text{cm}^{-1}$, 自旋-自旋相互作用参量为 $M_0 = 0.0990\text{cm}^{-1}$, $M_2 = 0.0078\text{cm}^{-1}$ 代入立方对称可完全对角化矩阵进行对角化计算, 得到由 T_1, T_2, E, B 构成的 10 条谱线, 光谱结构如图 2 左边所示. 将 3.1 节拟合的 B_{20}, B_{40}, B_{43} 的数值代入三角对称 (C_{3v}) 下可完全对角化矩阵, 得到由 $^4A_2, ^4T_1, ^4T_2$ 构成的 5 条谱线, 再加上自旋-轨道相互作用、自旋-自旋相互作用进行完全对角化计算得到由 E, B 构成的 14 条谱线, 其光谱结构如图 2 右边所示, 并将计算结果和实验值列于表 2. 因此, 由图 2 可知, 对于基态项 4F , 在自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用共同作用下的立方场 ($O_h + SO + SS$) 的光谱条数为 10 条, 经过三角畸变 (C_{3v} 畸变), 10 条谱线继续分裂, 其中 2 条 T_1 分裂成二组 E, B , 2 条 T_2 分裂为二组 B, E 及其他 B, E 构成了在自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用共同作用下的三角场 ($C_{3v} + SO + SS$) 的 14 条光谱线, 证实了群理论的正确性. 其中 T_1, T_2 分裂的光谱能级如图 2 箭头右边所示. 由表 2 可得到 J-T 效应分裂的理论计算值和实验值分别列入表 3. 必须指出, 自旋-自旋相互作用会使自旋-轨道相互作用产生的精细能级发生平移, 这仅改善光谱能级与实验值的符合程度, 并不产生新的分裂, 故考虑了自旋-自旋相互作用后的理论计算值和实验值更加符合. 显然, T_1 的 E 与 B 的分裂, T_2 的 B 与 E 的分裂不是自旋-自旋相互作用的结果, 而这种分裂对晶体结构的畸变非常敏感, 它们包含着丰富的晶体内部信息. 计算表明, 立方对称的晶场不可能使 T_1, T_2 发生能级分裂, 只有在低

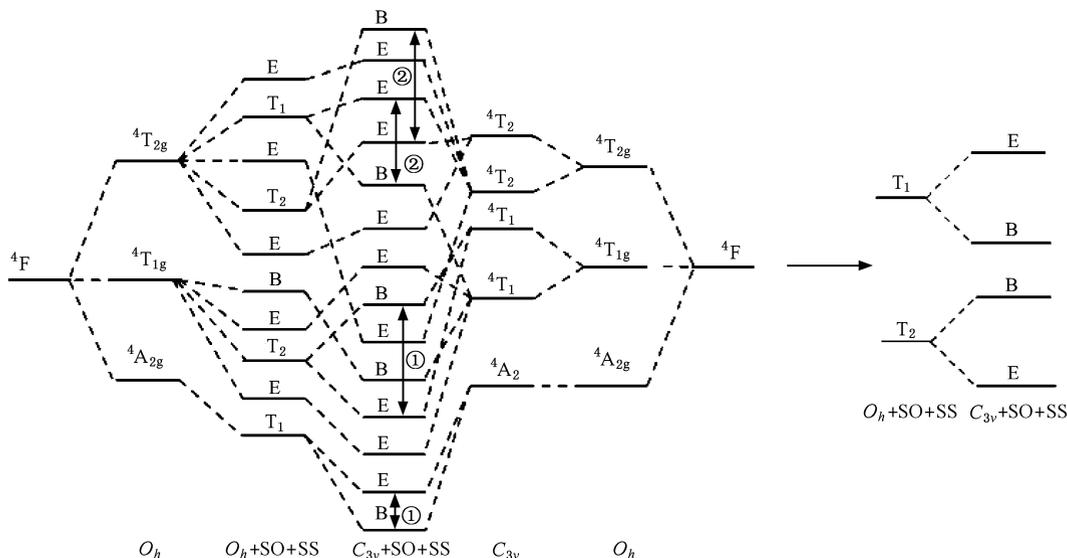


图 2 Cr³⁺ 离子在立方对称和三角对称晶场中基态能级的分裂图像

于立方对称的三角对称晶场与自旋-轨道相互作用共同作用下才会产生这种分裂,二者缺一不可.这表明 Cr³⁺ 络离子局域结构发生了低对称畸变,这种畸变和自旋-轨道相互作用导致了 J-T 效应的存在. J-T 效应是对于非线性分子, Kramers 简并的任何电子简并态^[14,15]其结构是不稳定的,必将产生电环境畸变,导致其简并态得以解除. T₁, T₂ 态是轨道和自旋简并态,由于晶体结构发生了三角畸变,再加上自旋-轨道相互作用使得 T₁, T₂ 的简并得到了解除,从而产生了分裂. 这就是 J-T 效应作用的结果.

表 2 Cr³⁺ 离子在立方对称和三角对称晶场下的基态能级的精细结构(cm⁻¹)

	O _h	O _h + SO + SS	C _{3v}	C _{3v} + SO + SS	实验值 ^[23]
⁴ A _{2g}	0	0	0	0	0
			⁴ A ₂	0.3831	0.3831
⁴ T _{1g}	16267	16196	⁴ T ₁	18000	17965
		16242			17988
					18012
					18044
			⁴ T ₁	18328	18340
					18348
⁴ T _{2g}	22409	21590	⁴ T ₂	24101	22208
		22418			24112
					24113
					24138
					24239
			⁴ T ₂	25043	25053
					25054
					25100

表 3 Cr³⁺:Al₂O₃ 的 J-T 效应(cm⁻¹)

	计算值		实验值 ^[23]	
T ₁	0.3831	4	0.3831	—
T ₂	352	941	400	800

4. 结 论

1. 本文采用不可约张量方法和群的理论,推导了 3d³/3d⁷ 态离子在三角对称晶场中的 120 阶全谱项哈密顿矩阵. 应用推导的可完全对角化矩阵和完全对角化方法对 Cr³⁺:Al₂O₃ 晶体的精细光谱和零场分裂参量进行了计算,同时定量讨论了自旋二重态对基态能级的影响,理论与实验相符合.

2. 自旋-自旋相互作用并不能使自旋-轨道相互作用产生的精细能级发生新的分裂,只能使这些能级发生移动,并且能够使基态能级和零场分裂参量更加接近实验值,自旋-自旋的自旋二重态对基态光谱能级和零场分裂参量 D 没有贡献.

3. Cr³⁺:Al₂O₃ 晶体的基态光谱结构中存在着 J-T 效应,自旋-轨道的自旋二重态对基态光谱能级和零场分裂参量的影响是很显著的,它能够使基态能级和零场分裂参量更加接近实验值,而且是不能忽略的.

4. 自旋-轨道相互作用和自旋-自旋相互作用分别对基态光谱能级和零场分裂的影响程度和方式是不一样的.

- [1] Yang Z Y , Wei Q 2004 *Chin. J. Chem. Phys.* **17** 401 (in Chinese) [杨子元、魏 群 2004 化学物理学报 **17** 401]
- [2] Gass A M 1969 *J. Chem. Phys.* **50** 1501
- [3] Macfarlane R M 1970 *Phys. Rev. B* **1** 989
- [4] Yang Z Y , Zhang H K 1996 *Journal of Baoji College of Arts and Science* (Natural Science) **16** 35 (in Chinese) [杨子元、张海康 1996 宝鸡文理学院学报(自然科学版) **16** 35]
- [5] Yang Z Y 2000 *Chin. J. Chem. Phys.* **13** 190 (in Chinese) [杨子元 2000 化学物理学报 **13** 190]
- [6] 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 扬、张雷、宋 宁、茹瑞鹏 2006 物理学报 **55** 1991]
- [7] Yeung Y Y , Rudowicz C 1992 *Computers and Chemistry* **16** 207
- [8] Yu W L 1993 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Edition) **2** 610
- [9] Zhou Y Y 2002 *Chin. J. Chem. Phys.* **15** 401 (in Chinese) [周一阳 2002 化学物理学报 **15** 401]
- [10] Yang Z Y 2000 *Appl. Magn. Reson.* **18** 455
- [11] Yin C H , Han K , Ye S W 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2280 (in Chinese) [殷春浩、韩 奎、叶世旺 2003 物理学报 **52** 2280]
- [12] Yang Z Y , Li Z H , Zhang L 1997 *Journal of Baoji College of Arts and Science* (Natural Science) **17** 28 (in Chinese) [杨子元、李宗红、张 林 1997 宝鸡文理学院学报(自然科学版) **17** 28]
- [13] Griffith J S 1965 *Theory of Transition Metal Ions* (Shanghai : Shanghai Science and Technology Publishers) (in Chinese) [J. S. 格里菲斯 1965 过渡金属离子理论 (上海 : 上海科学技术出版社)]
- [14] Zhao M G 1991 *Crystal Field and Electron Paramagnetic Resonance Theory* (Beijing : Science Press) (in Chinese) [赵敏光 1991 晶体场和电子顺磁共振理论 (北京 : 科学出版社)]
- [15] Zhao M G 1988 *Crystal Field Theory* (Chengdu : Sichuan Education Publishing House) (in Chinese) [赵敏光 1988 晶体场理论 (成都 : 四川教育出版社)]
- [16] Wang Q , Han K , Yin C H 2003 *J. Xuzhou Normal Uni.* (Natural Sciences) **21** 26 (in Chinese) [王 群、韩 奎、殷春浩 2003 徐州师范大学学报(自然科学版) **21** 26]
- [17] Horie H 1953 *Progress of Theoretical Physics* **10** 296
- [18] Trees R E 1951 *Physical Review* **82** 683
- [19] Yang Z Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1981 (in Chinese) [杨子元 2004 物理学报 **53** 1981]
- [20] Zhao M G , Du M L , Shen G Y 1987 *J. Phys. C* **20** 5557
- [21] Li L and Yu W L 1997 *J. Sichuan Normal Univ.* (Natural Science) **20** 3 (in Chinese) [李 玲、余万伦 1997 四川师范大学学报(自然科学版) **20** 3]
- [22] Fraga S , Karwowski J , Saxena K M S 1976 *Handbook of Atomic Data* (Elsevier Scientific Publishing company , Amsterdam Oxford-New York)
- [23] Fairbank W M , Klauminzer G K , Schawlow A L 1975 *Phys. Rev. B* **11** 60

Energy-level splitting of ground-states and Jahn-Teller effects in ruby crystal^{*}

Yin Chun-Hao^{1)†} Zhang Lei¹⁾ Zhao Ji-Ping²⁾ Jiao Yang¹⁾ Song Ning¹⁾ Ru Rui-Peng¹⁾ Yang Liu¹⁾

¹⁾ College of Science , China University of Mining and Technology , Xuzhou 221008 , China)

²⁾ Department of Physics , Xuzhou Normal University , Xuzhou 221008 , China)

(Received 24 March 2006 ; revised manuscript received 4 June 2006)

Abstract

The completely diagonalized Hamiltonian matrixes of order 120 of $3d^3/3d^7$ ions configuration in the trigonal symmetry have been established by irreducible representation method and group theory , taking into account spin-orbit interaction and spin-spin interaction. The ground-state energy levels , the zero-splitting parameter and Jahn-Teller effect of ruby crystal were calculated with the matrixes. The contributions of spin doublets for the ground-state energy levels were studied. The results show that the contributions of doublets cannot be neglected. The values of theoretical calculation conform with the experiments. On this basis , the influence of spin-spin interaction on the fine structure and zero-field splitting parameter of ruby crystal was further studied , and we found that the influence of spin-spin interaction on the zero-field splitting cannot be neglected.

Keywords : ground-state energy levels , fine structure , spin-spin interaction , zero-field splitting

PACC : 7170C , 7630F

^{*} Project supported by the Laboratory Set-up Foundation for Returned Overseas Chinese Scholars from the Ministry of Education of China (Grant No. 2003. 18) and the Foundation for Excellent Innovative Team of China University of Mining and Technology (Grant No. 2004ZCX012).

[†] E-mail : chunhaoyin@sohu.com