

АЛГОРИТМ РАСШИФРОВКИ СПЕКТРОВ ЭПР КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ДЕФЕКТАМИ С $S = 3/2$

Г.В. Сиразиева, В.А. Уланов

ФГБОУ ВО «КГЭУ», г. Казань, Республика Татарстан

e-mail: sirazieva.guzel@mail.ru

Предложен алгоритм расшифровки спектров ЭПР парамагнитных дефектов со спиновыми моментами $S = 3/2$, характеризующихся большими начальными расщеплениями основного спинового мультиплета и симметрией магнитных свойств не ниже орторомбической. Предложенный алгоритм существенно облегчает процесс расшифровки наблюдаемых спектров ЭПР, поскольку при расшифровке используются аналитические выражения, связывающие наблюдаемые интервалы между линиями ЭПР и их относительные интенсивности с параметрами спинового гамильтониана исследуемого центра.

Ключевые слова: метод ЭПР, спектр ЭПР, спиновый гамильтониан, теория возмущений, электронное зеемановское взаимодействие, метод вращения базисных волновых функций.

Метод ЭПР известен как один из наиболее информативных методов изучения и контроля свойств материалов, имеющих в своем объеме парамагнитные центры (атомы, ионы или точечные дефекты с некомпенсированными электронными моментами и диамагнитные атомы, принадлежащие к их первой координационной сфере). Основная модель, которая используется в методе ЭПР – модель спинового гамильтониана (СГ). Обычно, для того, чтобы выяснить природу исследуемых парамагнитных дефектов, выявляются наиболее важные взаимодействия, определяющие величины измеренных параметров СГ и выдвигаются возможные модели дефекта. На базе критического анализа выдвинутых моделей дефекта отбирается наиболее вероятная модель, описывающая непротиворечиво все наблюдаемые факты. Выбранная модель позволяет делать заключения о причинах возникновения обнаруженных в материале парамагнитных дефектов и способах борьбы с процессами появления этих дефектов. Однако в процессе расшифровки наблюдаемых спектров ЭПР возникают проблемы. Одна из основных проблем – недостаточная величина кванта $h\nu$ используемого электромагнитного поля. Эта проблема

возникает в случае, когда парамагнитный дефект характеризуется электронным спиновым моментом $S > 1/2$. В этом случае энергетические интервалы между уровнями нижнего спинового мультиплета даже в отсутствие внешнего магнитного поля могут оказаться существенно большими по сравнению с величиной $h\nu$. В таких условиях образцы исследуемых материалов должны быть исследованы на различных частотах (т.е. должна быть реализована мультимастотная ЭПР-спектроскопия). По этой причине актуальными оказываются задачи: а) создание эффективных алгоритмов расшифровки спектров ЭПР, зарегистрированных на нескольких частотах; б) создание генераторов, которые работают на нескольких частотах и могут быть подключены к промышленным узкополосным спектрометрам ЭПР.

В данной работе создан алгоритм расшифровки спектров ЭПР парамагнитных дефектов с $S = 3/2$, имеющих симметрию не ниже орторомбической. При создании алгоритма использована теория возмущений и метод вращений базисных волновых функций, используемых для представления СГ дефекта. Рассмотрен спиновый гамильтониан, включающий в себя оператор взаимодействия электронного спинового момента центра с кристаллическим полем, оператор электронного зеемановского взаимодействия, оператор взаимодействия электронного спинового момента со спиновыми моментами собственного ядра и ядер лигандов и оператор ядерных зеемановских взаимодействий. Получены выражения, позволяющие связать аналитически интервалы между линиями ЭПР и их относительные интенсивности с параметрами СГ. В результате использования полученных выражений процесс расшифровки спектра ЭПР существенно облегчается.

Источники

1. Абрагам А. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т.1 / А. Абрагам, Б. Блини. М: Издательство «Мир», 1972. – 652 с.
2. Misra S.K. Multifrequency electron paramagnetic resonance / S.K. Misra. Germany: Willey-VCH Verlag & Co, 2011. – 1022 p.

