

XXIV Международная научная конференция

НОВОЕ в
МАГНЕТИЗМЕ и
МАГНИТНЫХ
МАТЕРИАЛАХ



1 – 8 июля 2021 года
Сборник трудов

Москва, 2021

УДК 537.632

МАГНИТНЫЙ КРУГОВОЙ ДИХРОИЗМ И ПОГЛОЩЕНИЕ КРИСТАЛЛА $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ В ОБЛАСТИ $f-f$ ПЕРЕХОДА $^5I_8 \rightarrow ^5S_2$

Соколов В. В.

к.ф.м.н., м.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Малаховский А. В.

д.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Гудим И. А.

к.ф.м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Аннотация. Работа посвящена изучению спектров поглощения и магнитного кругового дихроизма (МКД) кристалла $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$. С помощью спектров МКД определены Зеемановские расщепления линий поглощения. Зеемановские расщепления также вычислены теоретически в приближении волновых функций свободного иона.

Ключевые слова: ионы Ho^{3+} , $f-f$ переходы, магнитный круговой дихроизм.

MAGNETIC CIRCULAR DICHROISM AND ABSORPTION OF $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ CRYSTAL IN THE REGION OF $f-f$ TRANSITION $^5I_8 \rightarrow ^5S_2$

Sokolov V. V.

candidate phys.-math. sciences, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Malakhovskii A. V.

doctor phys.-math. sciences, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Gudim I. A.

candidate phys.-math. sciences, Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS

Annotation. This work is devoted to the study of the absorption and magnetic circular dichroism (MCD) spectra of the $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ crystal. The Zeeman splitting of the absorption lines was determined using the MCD spectra. Zeeman splittings were also calculated theoretically in the approximation of the wave functions of free ion.

Keywords: Ho^{3+} ion, $f-f$ transitions, magnetic circular dichroism.

Измерены спектры магнитного кругового дихроизма (МКД) и поляризованные спектры поглощения $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$ в области $f-f$ перехода $^5I_8 \rightarrow ^5S_2$ при температуре 90 К. Переходы из возбуждённых подуровней основного мультиплета идентифицированы на основании поляризации переходов с использованием правил отбора в симметрии D_3 . Заглавные буквы на рис. 1 и в табл. 1 обозначают переходы из основного состояния, а строчные буквы

обозначают переходы из возбуждённых подуровней основного мультиплета. Спектры поглощения были разложены на компоненты формы Лоренца и определены их интенсивности (табл. 1).

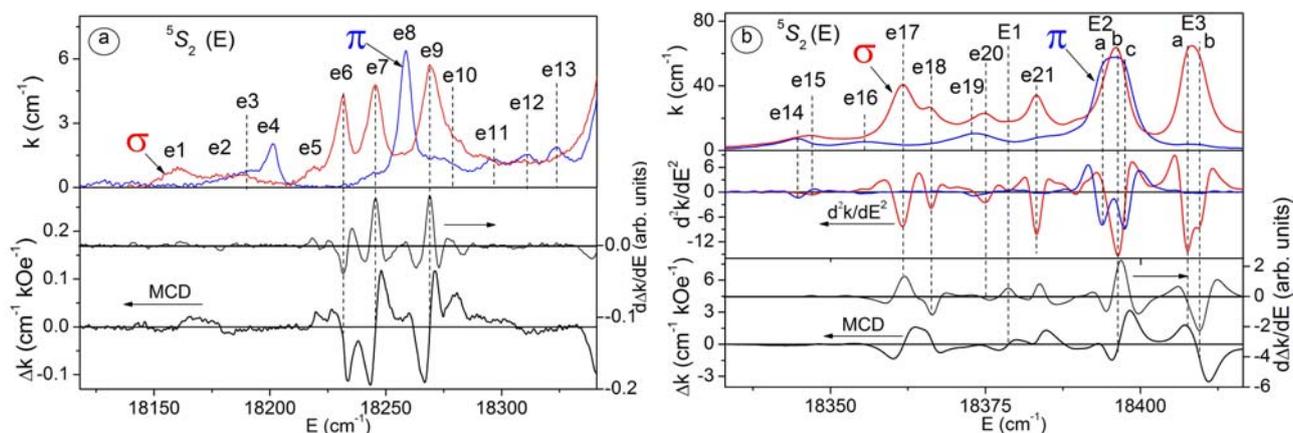


Рис. 1 (а, б). 1) Поляризованные спектры поглощения (k), вторая производная от поглощения (d^2k/dE^2), производная от дихроизма ($d\Delta k/dE$) и магнитный круговой дихроизм (Δk) перехода ${}^5I_8 \rightarrow {}^5S_2$ при температуре 90 К в $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$.

Таблица 1. Энергии уровней и переходов (E), интенсивности переходов в π и σ поляризациях (I_π , I_σ), измеренные экспериментально (Δg_C) и теоретические значения (Δg_{CM}) изменения фактора Ланде.

Мультиплеты	Уровни, переходы	E (cm^{-1}) (90 К)	I_π (cm^{-2})	I_σ (cm^{-2})	Δg_C	Δg_{CM}	M_J
5I_8	Gr1 (E_1)	0					1
	Gr2 (E)	12-12.8					
	Gr3 (A_1)	14-14.3					
	Gr4 (A_2)	20-22.5					
	Gr5 (A_2)	33-34.5					
	Gr6 (A_1)	123-127					
	Gr7 (E)	134-138					
	Gr8 (E)	144-149					
	Gr9 (A_2)	174-178					
5S_2	E1 (A_1)	18378.5		71	(+)		
	E2a (E_2)	18394	290				
	E2b (E_2)	18396		333	+5.3	+5.5	2
	E2c (E_2)	18397	226				
	E3a (E_1)	18407	π	122			
	E3b (E_1)	18409	10	278	-6.3	-6.5	1
	e6 (Gr8-E1)	18231		34.69	-5.1		
	e7 (Gr7-E1)	18245		45	+5.1		
	e9 (Gr7-E3)	18270	π	76	+4.5		
e17 (Gr5-E2)	18361.4		236.2	+5			

Используя спектры поглощения и МКД, были найдены значение Зеемановского расщепления $\Delta\omega_0$ согласно формуле:

$$\Delta\omega_0 = 2 \frac{\Delta k_{dm}}{k_m} |\omega_m - \omega_0| \quad (1)$$

Где Δk_{dm} и ω_m – это величина и положение экстремумов диамагнитной линии МКД соответственно, а k_m – амплитуда поглощения $\alpha(\sigma)$ поляризованной линии.

Экспериментальные изменения фактора Ланде Δg_C при переходах (табл. 1) были найдены по Зеемановскому расщеплению переходов в магнитном поле, направленном вдоль оси C_3 кристаллов из соотношения:

$$2\hbar\Delta\omega_0 = \mu_B H \Delta g_C \quad (2)$$

Основное состояние иона гольмия 5I_8 при переходе к кубической и далее к тригональной симметрии трансформируется следующим образом:

$$^5I_8 (J=8) \rightarrow A_1 + 2E + 2T_1 + 2T_2 \rightarrow A_1 + 2E + 2(A_1+E) + 2(A_2+E) \quad (3)$$

Электронные состояния в одноосных кристаллах могут быть описаны в первом приближении волновыми функциями $|J, \pm M_J\rangle$ свободного атома и кристаллического квантового числа μ . Между значениями μ , M_J и неприводимыми представлениями состояний существует следующее соответствие [1]:

$$M_J = 0 \quad \pm 1 \quad \pm 2 \quad (\pm 3)_{1,2} \quad \pm 4 \quad \pm 5 \quad (\pm 6)_{1,2} \quad \pm 7 \quad \pm 8 \quad (4)$$

$$\mu = 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad 0 \quad \pm 1 \quad \mp 1 \quad (5)$$

$$A_1 \quad E_1 \quad E_2 \quad A_1, A_2 \quad E_1 \quad E_2 \quad A_1, A_2 \quad E_1 \quad E_2 \quad (6)$$

Дублеты E_1 и E_2 отличаются знаком μ . Проекция M_J определяет расщепление состояния в магнитном поле. Соответственно фактор Ланде g_{CM} дублета $\pm M_J$ в приближении $|J, \pm M_J\rangle$ волновых функций равен:

$$g_{CM} = 2gM_J \quad (7)$$

где g - фактор Ланде свободного иона (табл. 2). Тогда мы можем теоретически оценить изменения фактора Ланде Δg_{CM} при переходах между состояниями, используя правила отбора для числа μ [2].

Таблица 2. Факторы Ланде состояний (g_{CM}) вдоль оси C_3 в приближении функций $|J, \pm M_J\rangle$ свободного атома

		A_1	E_1	E_2	A_1, A_2	E_1	E_2	A_1, A_2	E_1	E_2
	M_J	0	1	2	$(\pm 3)_{1,2}$	4	5	$(\pm 6)_{1,2}$	7	8
State	g									
5I_8	1.25	0	2.5	5	0	10	12.5	0	17.5	20
5S_2	2.00	0	4	8						

Возбуждённые 5S_2 состояния расщепляются в кубическом и тригональном полях следующим образом:

$$^5S_2 \quad J=2 \rightarrow T_2 + E \rightarrow (A_1 + E) + E \quad (8)$$

E1 E2 E3

E1, E2 и E3 – общепринятые обозначения состояний и переходов в данном мультиплете.

В работе [3] из магнитных измерений и расчета кристаллического поля было получено, что фактор Ланде основного состояния $g_C=2.52$. Эта величина близка к теоретическому значению $g_{CM}=2.5$ (табл. 2) для состояния $M_J=1$ с симметрией E_1 . Для определения знаков Зеемановских расщеплений переходов была использована табл. 3, которая была получена в работе [2] из диаграммы переходов и правил отбора для состояний с целым моментом.

Таблица 3. Знаки Зеемановских расщеплений переходов. Первые знаки для переходов $E_1 \leftrightarrow E_2$ относятся к случаю, когда расщепление основного состояния больше, чем расщепление возбуждённого состояния. Абсолютная величина расщепления переходов $E_1 \rightarrow E_1$ и $E_2 \rightarrow E_2$ равна сумме расщеплений основного и возбуждённого состояний, а переходов $E_1 \leftrightarrow E_2$ равна разности.

	A	E_1	E_2
$A \rightarrow$	0	(-)	(+)
$E_1 \rightarrow$	(-)	(-)	(-,+)
$E_2 \rightarrow$	(+)	(+,-)	(+)

В линии **E3(E_1)** наблюдается расщепление на две составляющие E3a и E3b (рис. 1b), вследствие локального искажения кристаллического поля в возбуждённом состоянии. Зеемановское расщепление перехода $\text{Gr1}(J=8, M_J=1, g_{CM}=2.5, E_1) \rightarrow \text{E3}(J=2, M_J=1, g_{CM}=4, E_1)$ согласно таблицам 2 и 3 равно: $\Delta g_{CM} = -6.5$, что близко к экспериментальному значению -6.3.

Рассмотрим теперь линию **E2(E_2)**. Из производной от спектра МКД и второй производной от спектра поглощения видно, что данная линия состоит из трёх линий (рис. 1b). Это возможно, если при электронном переходе происходит локальное понижение симметрии как в возбуждённом так и в основном состоянии. Зеемановское расщепление перехода $\text{Gr1}(J=8, M_J=1, g_{CM}=2.5, E_1) \rightarrow \text{E2}(J=2, M_J=2, g_{CM}=8, E_2)$ согласно табл. 2 и 3 равно: $\Delta g_{CM} = +5.5$, что близко к экспериментальному результату +5.3.

Линия **E1(A_1)** плохо разрешена, и как результат не удастся определить величину Δg_C , но из производной от МКД (рис. 1b) можно определить знак расщепления. Для идентификации свойств возбуждённых подуровней основного мультиплета необходимо анализировать спектры МКД и поглощения одновременно нескольких полос поглощения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ грант № 19-02-00034, а также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: № 19-42-240003 «Влияние локального окружения на магнитооптические свойства $f-f$ переходов в редкоземельных алюмоборатах и ферроборатах»

Список использованных источников:

- [1] Ельяшевич М.А. Спектры редких земель, Москва, ГИТ-ТЛ, 1953.
- [2] Malakhovskij A. V., Sokolov V. V., Gudim I. A. Magnetic circular dichroism and absorption of $\text{HoFe}_3(\text{BO}_3)_4$ crystal in the region of $f-f$ transitions $^5I_8 \rightarrow ^5F_2$ and 5F_3 . *Fizika Nizkikh Temperatur.* – 2020. – Т. 46. – №. 7. – С. 869-876.
- [3] Begunov A.I., Demidov A.A., Gudim I.A., and Eremin E.V., Features of the magnetic and magnetoelectric properties of $\text{HoAl}_3(\text{BO}_3)_4$, *JETP letters* 97 (2013) 528-534.