

光谱学

## Cr<sup>3+</sup> : MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>晶体的基态能级分裂及Jahn-Teller效应\*

张雷<sup>1</sup>;殷春浩<sup>2</sup>;黄志敏<sup>2</sup>;焦杨<sup>2,3</sup>

中国矿业大学 理学院,江苏 徐州 221008<sup>1</sup>

中国矿业大学理学院物理系<sup>2</sup>

收稿日期 2007-4-17 修回日期 2007-7-3 网络版发布日期 2007-10-19 接受日期

摘要 构造了3d<sup>3</sup>/3d<sup>7</sup>离子在三角对称晶场中考虑自旋-轨道相互作用,自旋-自旋相互作用和自旋-其它轨道相互作用的120阶微扰哈密顿矩阵.利用完全对角化该矩阵的方法计算了Cr<sup>3+</sup> : MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>晶体的基态能级、零场分裂参量,理论计算值与实验值相符合.定量研究了自旋二重态对基态能级的贡献,证明该贡献是不可忽略的.定量研究了自旋-轨道相互作用、自旋-自旋相互作用和自旋-其它轨道相互作用对Cr<sup>3+</sup> : MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>晶体的光谱精细结构和零场分裂参量的影响,发现自旋-轨道和自旋-自旋相互作用对基态能级和零场分裂参量的影响的程度和方式是不同的,自旋-其它轨道相互作用的影响也是不可忽略的.通过理论计算值和实验值的比较,证实了在Cr<sup>3+</sup> : MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>晶体中Jahn-Teller效应的存在,解释了该晶体的光谱精细结构的成因.

关键词 [分子光谱学](#) [基态能级](#) [晶体场理论](#) [精细结构](#) [零场分裂](#) [Jahn-Teller效应](#)

分类号 [O734](#)

通讯作者 张雷 [cumtztl@126.com](mailto:cumtztl@126.com)

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(642KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

#### 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子光谱学”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [张雷](#)
- [殷春浩](#)
- [黄志敏](#)
- [焦杨](#)
-