

Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的能谱以及 R 线热移位的理论研究*

杨阔¹, 宋永¹, 戴宏²

(1. 阿坝师范高等专科学校 四川 成都 611741; 2. 云南大学物理科学技术学院 云南 昆明 650091)

摘要: 通过对角化由强场方案和无耦合的三角基建立的三角畸变的八面体场中的 d^3 离子完全能量矩阵, 对 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 在低温下的能谱及波函数进行了拟合计算. 同时分析了各个参数对部分能级的影响, 定量地显示了能级分裂的影响因素. 利用得到的波函数, 采用光谱热移位理论, 对 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的 R 线热移位现象进行了分析和计算, 各项计算结果均与实验符合较好, 进一步反映了热移位的微观机制.

关键词: 晶体场; 能谱; 完全能量矩阵; 热移位

中图分类号: O 482.3 文献标识码: A 文章编号: 0258-7971(2010)06-0665-05

自人们发现能用一系列三价铬离子激活的镓族石榴石晶体(Galian Garnet)获得室温可调谐激光以来, 石榴石晶体家族由于其光学性质引起了人们很大的兴趣^[1-8], Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 作为近红外可调谐的固体激光材料的一种, 同样也得到了理论和实验的重视, 不少的文献对它的光谱性质做了分析和讨论, 特别是对是多中心的 R 线开展了相应的研究, 取得了较为理想的结果^[3, 9-14], 但是对该晶体的完全能谱的理论计算以及 R 线热移位的理论研究却未见报道. 本文应用强场方案, 通过将完全能量矩阵对角化进行最小二乘拟合, 并利用对角化完全能量矩阵得到的本征矢, 对 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的光谱作了相应的归属. 并结合文献[14~15]中的 R 线的热移位实验数据, 基于热移位理论^[16], 采用电子-声子耦合模型, 对 R 线的热移位做了统一计算, 结果和实验数据符合较好, 进一步证明了所用模型的合理性.

1 常压低温能谱的理论计算

Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 属于反铁磁类晶体. M. Yamaga 等详细地研究了 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的 R 线的磁场周期性极化和边带谱以及 R₁ 线的均匀和非均匀展宽^[13], 结果表明荧光谱线窄化技术(FLN)能对由应变和成分无序造成的非均匀展宽有消除作用, 同时也对由单胞中处于八面体格位的 Cr³⁺ 与处于十二面体格位的 Gd³⁺ 的自旋-自旋交换相互作用所引起的宽化也有影响; 而外加磁场对于由反铁磁交换作用引起的均匀展宽也有消除作用. 对激光晶体 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的 X 射线研究表明, 它具有三角畸变的八面体晶场, 具有如下的取代情况: Cr³⁺ 占据八面体对称 A 格位, 大量的稀土离子 Gd、Sc 等占据十二面体对称 C 格位, 少量的 Al 离子占据四面体对称的 D 格位^[17]. 处于八面体格位的 Cr³⁺ 离子的晶场哈密顿量通常的处理方法是依据 Tanabe-Sugano 图来分析^[18], Cr³⁺ 离子的电子能级由八面体晶体场与拉卡参量决定. Marshall 等^[19]发现该晶体有 3 个发光中心, 不同的中心具有不同的 Cr³⁺ 离子占位情况, 这样的结构导致了 3 条 R 线的出现, 具体位置见表 1. 由于 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的 R 线结构的复杂性, 我们选取了发射强度较大的 a 中心为强场中心对 R 线做拟合. 根据文献[19]的实验数据, 对 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 的 R 线做了拟合, 经过计算发现 R 线在能谱拟合中占有很重要的比重, 因此我们以 R 线作为我们拟合时的重要参考标准. 经过计算优化得到一组参数值: $Dq = 1\ 500\ \text{cm}^{-1}$, $B = 610\ \text{cm}^{-1}$, $C = 3\ 400\ \text{cm}^{-1}$, $\zeta = \zeta' = 204\ \text{cm}^{-1}$, $K =$

* 收稿日期: 2010-01-07

基金项目: 阿坝师专校级重点资助项目(ASA10-15)

作者简介: 杨阔(1980-), 四川人, 硕士, 讲师, 主要研究方向为凝聚态物理. E-mail: phygroup@163.com.

210 cm⁻¹ $K' = 710$ cm⁻¹.

通过这组参数值拟合出来的 R 线能谱数据和实验数据的比较见表 1 R 线的拟合值与实验值符合得较好.

表 1 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 常压低温 (10 K) 下 R 线的 3 个发光中心以及对 a 中心的拟合计算值

Tab. 1 The three luminescence centers of R lines of Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ at normal pressure and low temperature (10 K) and the calculated value to the center a

R 线	实验值 ^[19] /cm ⁻¹	计算值/cm ⁻¹
R_1 (a)	14 478.07	14 476.49
R_2 (a)	14 532.77	14 532.80
R_1 (b)	14 509.58	
R_2 (b)	14 564.52	
R_1 (c)	14 446.69	
R_2 (c)	14 503.26	

2 热移位的理论计算

根据光谱的热移位理论^[16], 充分考虑电-声子耦合, 将 Gd₃Sc₂Al₃O₁₂: Cr³⁺ 在常压下的 R 线热移位分为以下几个部分.

2.1 电-声子耦合的声学支贡献 电-声子耦合相互作用的哈密顿量可以写为

$$H_{\text{int}} = H^{(1)} + H^{(2)}, \quad (1)$$

$$H^{(1)} = \sum_{\Gamma M} C(\Gamma M) \varepsilon(\Gamma M), \quad (2)$$

$$H^{(2)} = \sum_{\Gamma M} \sum_{\Gamma' M'} \sum_{\Gamma'' M''} D(\Gamma M; \Gamma' M' \Gamma'' M'') \cdot \varepsilon(\Gamma' M') \varepsilon(\Gamma'' M''). \quad (3)$$

这里只考虑了哈密顿量的一阶及二阶微扰项. Γ , Γ' 和 Γ'' 分别表示中心金属离子所属点群的不

可约表示; M , M' 和 M'' 表示对应不可约表示的基函数. $C(\Gamma M)$ 与 $D(\Gamma M; \Gamma' M' \Gamma'' M'')$ 是过渡金属离子 Cr³⁺ 的 d 电子的轨道算符 $\varepsilon(\Gamma M)$, $\varepsilon(\Gamma' M')$ 和 $\varepsilon(\Gamma'' M'')$ 是它的声子算符; 在 $H^{(2)}$ 中, $\Gamma' \times \Gamma'' = \sum_i \Gamma_i$, 并且 $D(\Gamma M; \Gamma' M' \Gamma'' M'')$ 按照不可约表示 Γ 的第 M 个基函数的变换规律变换.

考虑 d^3 电子组态的所有能级和波函数的混合以及所有可能的 ΓM (这里只考虑 E_g 和 T_{2g} 声子态), 由电-声子耦合引起的第 i 能级的热移位中的 2 项: 拉曼项 $\delta E^{(1)}$ 和相邻能级项 $\delta E^{(2)}$ 可以写为

$$\delta E_i^{(1)} = a_i T^4 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \quad (4)$$

$$a_i = \frac{1}{60\pi^3 c \rho} \left(\frac{1}{v_i^5} + \frac{3}{2v_i^5} \right) \left(\frac{k_B}{h} \right)^4 \times \left\{ \sum_{j \neq i} \frac{[\sum_M |\langle \psi_i^{el} | c(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle|^2 + 8 \sum_M |\langle \psi_i^{el} | c(EM) | \psi_j^{el} \rangle|^2]}{E_i^{el} - E_j^{el}} + \sum_M \langle \psi_i^{el} | D(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle \right\} \quad (5)$$

这里 T_D 为声频支的德拜温度, c 为光速, ρ 为晶体的平均密度, v_1 和 v_i 分别表示纵向和横向的声速, ψ^{el} 和 E^{el} 则分别表示纯电子波函数和能级. 为方便起见, 可以写出 $\alpha_i = \alpha_i^c + \alpha_i^d$, 这里角标 c 表示 $c(T_2 M)$ 和 $C(EM)$ 的贡献, 而 d 则表示 $D(T_2 M)$ 部分的贡献.

$$\delta E_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \beta_{ij} \left(\frac{T}{T_{ij}} \right)^2 P \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^3}{(e^x - 1) \left[x^2 - \left(\frac{T_{ij}}{T} \right)^2 \right]} dx, \quad (6)$$

$$\beta_{ij} = -T_{ij}^3 D_{ij}^3 = T_{ij}^3 D_{ij}^3,$$

$$D_{ij} = \frac{k_B^3}{60\pi^3 c \rho h^4} \left(\frac{1}{v_i^5} + \frac{3}{2v_i^5} \right) \left[\sum_M |\langle \psi_i^{el} | c(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle|^2 + 8 \sum_M |\langle \psi_i^{el} | c(EM) | \psi_j^{el} \rangle|^2 \right], \quad (7)$$

这里有 $T_{ij} = \frac{(E_i^{el} - E_j^{el})}{k_B} P$ 表示主值积分.

2.2 光学支部分对热移位的贡献 在这一部分, 运用了光学支的声子模型, 原因是光学支部分对热移位

的影响在高温下显得更为重要 据文献 [16] 我们有

$$\delta E_i^{(3)} = \gamma_i \left(\frac{T_D^5}{T_0} \right) \left(e^{\frac{\hbar\omega_{\text{eff}}}{k_B T}} - 1 \right) = \gamma_i \left(\frac{T_D^5}{T_0} \right) \left(e^{\frac{T_0}{T}} - 1 \right)^{-1} \quad (8)$$

$$\gamma_i = \left\{ \frac{\sum_M \left| \langle \psi_i^{el} | c(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle \right|^2 + 8 \sum_M \left| \langle \psi_i^{el} | c(EM) | \psi_j^{el} \rangle \right|^2}{(E_i^{el} - E_j^{el})^2 - (\hbar\omega_{\text{eff}})^2} (E_i^{el} - E_j^{el}) + \sum_M \langle \psi_i^{el} | D(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle \right\} \frac{1}{120\pi^3 c\rho v_s^5} \left(\frac{k_B}{\hbar} \right)^4, \quad (9)$$

这里 γ_i 与温度无关 ω_{eff} 为光学支的等效声子频率 我们可以从光学支的声子态密度谱上得到; $T_0 \equiv \frac{\hbar\omega_{\text{eff}}}{k_B}$,

v_s 定义为 $\frac{3}{v_s^3} = \frac{2}{v_3^3} + \frac{1}{v_l^3}$; 与 $\alpha_i = \alpha_i^c + \alpha_i^d$ 相似 我们可以写出 $\gamma_i = \gamma_i^c + \gamma_i^d$.

2.3 锐线的热移位 (R_1 线与 R_2 线) 从公式 (1) ~ (9) 看出 由电子 - 声子耦合引起的第 i 能级的热移位可以写为: $\delta E^{(1)} + \delta E^{(2)} + \delta E^{(3)}$ 即由 3 部分组成. 因此 R_1 与 R_2 线的热移位可以写为

$$\Delta E_{\text{cal}}(R_1) = \Delta E^{(1)}(R_1) + \Delta E^{(2)}(R_1) + \Delta E^{(3)}(R_1), \quad (10)$$

$$\Delta E_{\text{cal}}(R_2) = \Delta E^{(1)}(R_2) + \Delta E^{(2)}(R_2) + \Delta E^{(3)}(R_2). \quad (11)$$

这里 $\Delta E^{(k)}(R_i) = \delta E^{(k)}(R_i \text{ 能级}) - \delta E^{(k)}(G_i \text{ 能级})$ ($k = 1$ 或 3 ; $i = 1$ 或 2); $\delta E^{(2)}(R_1) = \delta E^{(2)}(R_1)$ 因为 $\delta E^{(2)}(G_1 \text{ level})$ 比 $\delta E^{(2)}(G_2 \text{ level})$ ($i = 1, 2$) 小得多 所以在这里就不予考虑 G_1 和 G_2 分别代表 $t_2^{34}A_2\bar{2}A$ 和 $t_2^{34}A_2\bar{2}E$ 两个能级.

这样 从公式 (4) 到 (11) 我们把 R_1 和 R_2 线的热移位用 D_{ij} α^c α^d α γ^c γ^d γ 表示出来 关键的问题是如何确定这几个量 它们所得出的结果是否与实验结果符合得很好.

根据维格纳 - 艾卡定理 所有的 $\langle \psi_i^{el} | c(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle$, $\langle \psi_i^{el} | c(EM) | \psi_j^{el} \rangle$, $\langle \psi_i^{el} | D(T_2 M) | \psi_j^{el} \rangle$ 都可以做简化计算 采用不可约张量算符法 $\mathcal{C}(T_2)$, $\mathcal{C}(E)$ 和 $D(T_2)$ 的所有 3 电子的约化矩阵元可以表达为 6 个单电子的约化矩阵元 Y_c ($\equiv \langle t_2 || C(D(T_2)) || t_2 \rangle$) Z_c ($\equiv \langle t_2 || C(T_2) || e \rangle$) P_c ($\equiv \langle t_2 || C(E) || t_2 \rangle$) Q_c ($\equiv \langle e || C(E) || e \rangle$) Y_d ($\equiv \langle t_2 || D(T_2) || t_2 \rangle$) 和 Z_d ($\equiv \langle t_2 || D(T_2) || e \rangle$) 的函数.

$\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$ 在低温下的 R 线中心处于 $14\,451\text{ cm}^{-1}$ (687.2 nm) 处 (谱线半宽大约为 22 cm^{-1}), 在高温时存在更高的发射线 谱线半宽增加到 29 cm^{-1} . 较大的非均匀展宽是由于晶体中 A 格位的 Gd^{3+} 与处于 B 格位的 Sc^{3+} 之间的阳离子反转造成的^[4] 而这也导致了测量谱线增宽的温度相关性的难度很大. 尽管如此 文献 [15] 通过对 R_1 和 R_2 线的热移位情况的分析 仅对拉曼项做了拟合 得出了拟合参数值 α , 但是没有考虑光学支的部分的影响 因此 R_1 线的拟合曲线和实验数据之间存在较大的误差.

本文根据文献 [14] 给出的该晶体在 $T = 7\text{ K}$ 下的发射谱以及热移位数据 分析确定德拜温度为 $T_D = 550\text{ K}$ 并根据发射谱估计光学支等效温度为 $T_0 = 680\text{ K}$. 为了减少参数的个数 将文献 [20] 得到的红宝石的 4 个参数 Y_c P_c Z_c 和 Q_c 的值都乘上一个校正参数 C_b 作为 $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$ 的相应参数 另外 将 Y_d 和 Z_d 作为 2 个独立的参数进行拟合. 这样 以低温常压下得到的能谱和波函数为基础 结合 3 个参数 C_b , Y_d Z_d 和热移位的实验数据 应用 Fortran 程序进行拟合计算 得到一组经过优化的参数值:

$$C_b = 0.9 \quad Y_d = 1.454 \times 10^7\text{ cm}^{-1} \quad Z_d = -9.877 \times 10^7\text{ cm}^{-1}.$$

通过这组参数值 可以得到在 R 线的热移位中各个部分所做的贡献 见表 2 3. 将表 2 3 通过坐标作图见图 1 通过表 2 和表 3 的数据以及图 1 可以看出 R_2 线的拟合数据与实验值符合得较好 而 R_1 线的拟合数据与实验值差距较大 出现这种现象的原因在分析与讨论中说明.

3 分析与讨论

本文对 $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$ 在低温常压下的部分能谱做了拟合计算 并对它的 R 线热移位做了理论计算 得到了与实验符合得较好的结果 较好地解释了该晶体激光光谱的热效应. 但是 对比此前作者采用相

表 2 R_1 线的热移位及各个部分的贡献 (cm^{-1})^[14-15]

Tab. 2 The thermal shifts and the contribution of various parts for R_1 line

T/K	$\Delta E^{\text{exp}a}$	$\Delta E^{\text{ca}/c}$	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(2)} (R_2 - {}^2T_1)$	$\Delta E^{(2)} (R_2 - R_1)$	$\Delta E^{(3)}$
90	-3.5	-1.7	-0.97	-0.75	0.10	-0.07
120	-8.4	-4.8	-2.45	-2.12	0.20	-0.46
150	-14.2	-10.0	-4.59	-4.26	0.32	-1.44
180	-20.1	-16.9	-7.23	-7.02	0.45	-3.11
210	-27.3	-25.3	-10.24	-10.24	0.60	-5.42
240	-32.2	-34.8	-13.52	-13.82	0.75	-8.30
270	-40.3	-45.4	-17.00	-17.66	0.91	-11.64

表 3 R_2 线的热移位及各个部分的贡献 (cm^{-1})^[14-15]

Tab. 3 The thermal shifts and the contribution of various parts for R_2 line

T/K	$\Delta E^{\text{exp}a}$	$\Delta E^{\text{ca}/c}$	$\Delta E^{(1)}$	$\Delta E^{(2)} (R_2 - {}^2T_1)$	$\Delta E^{(2)} (R_2 - R_1)$	$\Delta E^{(3)}$
90	-1.9	-2.4	-1.56	-0.82	-0.10	0.04
120	-5.2	-5.9	-3.96	-2.10	-0.20	0.26
150	-11.1	-10.7	-7.41	-3.84	-0.32	0.83
180	-16.8	-16.2	-11.68	-5.86	-0.45	1.78
210	-22.8	-22.1	-16.54	-8.05	-0.60	3.11
240	-27.8	-28.2	-21.85	-10.36	-0.75	4.75
270	-35.1	-34.5	-27.48	-12.72	-0.91	6.67

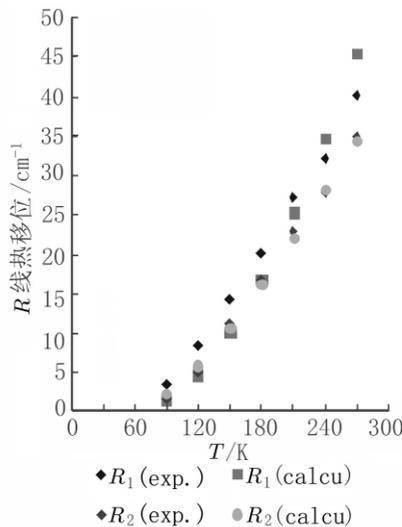


图 1 R 线热移位的实验值与计算结果比较

Fig. 1 Data of the R line thermal shifts from experiment and calculation

似方法对 YGG: Cr^{3+} 的研究结果^[21] 发现该晶体在能级计算和热移位计算的精度上与 YGG: Cr^{3+} 存在差异, 其原因是 2 种晶体的结构有所不同. 针对

该晶体的特点, 做如下分析:

(1) 由于 $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}: \text{Cr}^{3+}$ 的 3 个发光中心导致了 R 线构成的复杂性, 文献中对这种现象的处理也各不相同. 本文以 a 中心为参考, 对 $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}: \text{Cr}^{3+}$ 的能级做了计算和归属, 并以此为基础, 计算了 R 线的热移位, 计算结果基本能对该晶体的光谱热移位性质作出解释.

(2) 通过表 2、3 发现, 当温度逐渐升高时, R 线热移位的影响因素中, 光学支的地位越来越明显, 说明随着温度升高, 电-声子耦合变得剧烈, 对中心离子的能级影响较大.

(3) 比较温度相同时的 R_1 和 R_2 移位值发现, R_1 线的热移位值较大, 说明 R_1 线对温度更加敏感, 这也为改善该类激光器的稳定性提供了参考.

参考文献:

[1] Gerald Burns, GEISS E A, JENKINS B A et al. Cr^{3+} fluorescence in garnets and crystals [J]. Phys Rev, 1965, 139: A 1 687-1 701.

- [2] 尹民, 吴晓忠, 李华, 等. YGG: Cr^{3+} 晶体的光谱特性 [J]. 发光学报, 1986, 7: 269-274.
- [3] STRUVE B, HUBER G. The effect of the Crystal Field Strength on the Optical Spectra of Cr^{3+} in Garnet Laser Crystals [J]. Appl Phys B, 1985, 36: 195.
- [4] NIE Wen-jiang, BOULON Georges, MARES Jiri. Spectroscopy of multisites chromium (III) in yttrium aluminium garnet [J]. Chem Phys Lett, 1989, 160: 597-601.
- [5] YAMAGA M, HENDERSON B, O' DONNELL K P, et al. Fluorescence line narrowing – Zeeman spectroscopy of Cr^{3+} – doped $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ garnet crystals [J]. Appl Phys A, 1992, 54: 470-473.
- [6] YAMAGA M, HENDERSON B, O' DONNELL K P, et al. Temperature dependence of the lifetime of Cr^{3+} Luminescence in garnet crystals [J]. Appl Phys B, 1990, 51: 132-137.
- [7] 高文斌, 陈俊德, 杨石军, 等. YGG: Cr^{3+} 晶体的光谱特性 [J]. 物理学报, 1987, 36: 584-590.
- [8] 文根旺, 刘颂豪, $\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$ 激光晶体的发光特性 [J]. 发光学报, 1989, 10(2): 123-129.
- [9] YAMAGA M, HENDERSON B, O' DONNELL K P. Line shape of the Cr^{3+} luminescence in garnet crystals [J]. Phys Rev B, 1992, 46: 3 273-3 277.
- [10] YAMAGA M, HENDERSON B, O' DONNELL K P, et al. Temperature dependence of the lifetime of Cr^{3+} luminescence in garnet crystals I [J]. Appl Phys B, 1990, 50: 425-429.
- [11] STRUVE B, HUBER G. Laser performance of $\text{Cr}^{3+}:\text{Gd}(\text{Sc},\text{Ga})$ garnet [J]. J Appl Phys, 1985, 57: 45-49.
- [12] MA D P, ZHANG H M, LIU Y Y, et al. Theoretical calculation of optical and EPR spectra and their pressure – induced shifts for ruby [J]. J Phys Chem Sol, 1999, 60: 463-466.
- [13] YAMAGA M, GAO Y, O' DONNELL K P, et al. Fluorescence line narrowing Zeeman spectroscopy of Cr^{3+} – doped $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ garnet crystals. II. Calculation of the lineshape [J]. J Phys: Condens Matter, 1993, 5: 915-919.
- [14] VINK A P, MEIJERINK A. Electron – phonon coupling of Cr doped garnets [J]. J Phys Chem Solids, 2000, 61: 1 717-1 719.
- [15] VINK A P, MEIJERINK A. Electron – phonon coupling of Cr^{3+} in YAG and YGG [J]. J Lumin, 2000, 87: 601-604.
- [16] MA Dong-ping, CHEN Ju-rong. Energy spectrum of YAG: Cr^{3+} and Thermal Shifts of Its R Lines [J]. Commun Theor Phys (Beijing, China), 2005, 44: 165-169.
- [17] YAMAGA M, HENDERSON B, MARSHALL A, et al. Polarization spectroscopy of Cr^{3+} ions in laser host crystals: I. R lines and sidebands [J]. J Lumin, 1989, 43: 139-146.
- [18] SUGANO Y, TANABE H. Kaminura, multiples of transition metal ions in crystal [M]. New York: Academic Press, 1970.
- [19] MARSHALL A, O' DONNELL K P, YAMAGA M, et al. Disorder and the shape of the R – lines in Cr^{3+} – doped garnets [J]. Appl Phys A, 1990, 50: 565-572.
- [20] MA Dong-ping, CHEN Ju-rong. Improved ligand – field theory with effect of electron – phonon interaction [J]. Commun Theor Phys (Beijing, China), 2005, 43: 529-538.
- [21] YANG Kuo, ZHANG Ji-ping. Theoretical calculation of energy spectrum of YGG: Cr^{3+} and thermal shifts of Its R – Lines [J]. Commun Theor Phys (Beijing, China), 2009, 51: 914-918.

Theoretical research on the energy spectrum and R line thermal shifts of $\text{Gd}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}:\text{Cr}^{3+}$

YANG Kuo¹, SONG Yong¹, DAI Hong²

(1. A'ba Teacher's College, Chengdu 611741, China;

2. Physical Science and Technology College of Yunnan University, Kunming 650091, China)

- lating variations of b values and crustal deformation during the 1990's may have pinpointed the rupture initiation of the $M_w = 7.4$ Izmit earthquake of 1999 August 17 [J]. *Geophys J Int* 2002 ,148: 139-152.
- [19] SCHORLEMMER D ,NERO G ,WIEMER S ,et al. Stability and significance tests for b - value anomalies: Example from the Tyrrhenian Sea [J]. *Geophys Res Lett* , 2003 ,30(16) : 1 835 ,doi: 10. 1029/2003GL017335.
- [20] WYSS M ,SAMMIS C G ,NADEAU R M. Fractal dimension and b - value on creeping and locked patches of the San Andreas fault near Parkfield [J]. *California Bull Seismol Soc Am* 2004 ,94: 410-421.
- [21] SCHORLEMMER D ,WIEMER S ,WYSS M. Earthquake statistics at Parkfield: 1. Stationarity of b values [J]. *J Geophys Res* , 2004 ,109: B12307 , doi: 10. 1029/2004JB003234.
- [22] WYSS M ,STEFANSSON R. Nucleation points of recent main - shocks in southern Iceland mapped by b - values [J]. *Seismol Soc Am* 2006 ,96: 599-608 ,doi: 10. 1785/0120040056.
- [23] 刘祖荫 苏有锦 秦嘉政 等. 20 世纪云南地震活动 [M]. 北京: 地震出版社 2002.
- [24] 李全林 于涿 郝柏林 等. 地震频度 - 震级关系的时空扫描 [M]. 北京: 地震出版社 ,1979.

Study on b - value distributions in Yunnan based on regional spatial scanning

LI Tao , WU Xiao-ping , WANG Ying

(Department of Geophysics , Yunnan University , Kunming 650091 , China)

Abstract: The maximum - likelihood method is used for spatial scanning calculation of b - value. The patterns of b - value distribution in different regions in Yunnan are obtained. Based on it the characteristics of seismic activity in Yunnan are analyzed. The results show that the b value in Yunnan is generally high in west and low in east. Most of strong earthquakes occurred at the boundary of high and low b - value region. In addition , the b values at the locations where strong earthquakes occurred are 0. 65—0. 75 , which are smaller than the average b - value 0. 818.

Key words: Yunnan; seismic b - value; spatial scanning

(上接第 669 页)

Abstract: Based on diagonalizing the complete energy matrix in a trigonally - distorted octahedron - field constructed from the strong field scheme and non - coupling trigonal bases , the energy spectra and wave functions of $Gd_3Sc_2Al_3O_{12} : Cr^{3+}$ at low temperature and normal pressure are calculated. In the light of the wave function and the thermal shifts of spectra , we have calculated and analyzed the R line's thermal shift and we have found that the result is in agreement with the experimental data , which reveals the micro - mechanism of thermal shifts more profoundly.

Key words: crystal field; energy spectrum; complete energy matrix; thermal shifts