

论文

Cr³⁺在 AlBr₃·6H₂O晶体中电子顺磁共振光谱的理论研究

王敏杰,朱连轩*,林爱英

河南农业大学理学院, 河南 郑州 450002

摘要:

采用半自洽场(Semi-SCF)Cr³⁺3d轨道径向波函数、点电荷模型和三级微扰方法,计算了AlBr₃·6H₂O: Cr³⁺晶体中Cr³⁺电子顺磁共振的g(g=1.9707)因子和零场分裂D(D=-0.0323),理论值与实验值(实验值g=1.976±0.001,D=-0.0325±0.0001)符合很好。并认为在AlBr₃·6H₂O: Cr³⁺晶体中取键长R(Cr³⁺—O₂)=0.191nm是合理的。同时Cr³⁺离子掺入AlBr₃·6H₂O中占据Al³⁺离子位置后,引起键角较小的改变,仅增加0.35°。

关键词: AlBr₃·6H₂O: Cr³⁺ 自旋轨道耦合 电子顺磁共振(EPR) 晶场结构

Theoretical study of electron paramagnetic resonance of Cr³⁺ ions in AlBr₃·6H₂O crystals

WANG Min-jie, ZHU Lian-xuan*, LIN Ai-ying

College of Sciences, Henan Agricultural University, Zhengzhou 450002, Henan, China

Abstract:

According to the semi-SCF d-orbit radial function, the point-charge model and the third-order perturbation formulae, the g-factors(g=1.9707) and the zero-field splitting D(D=-0.0323) were calculated, and the calculated results are in good agreement with the experimental results (experimental values g=1.976±0.001, D=-0.0325±0.0001). The bond length R=(Cr³⁺—O₂)=0.191nm is rational. The angle increases a little (the increment 0.35°) after the Cr³⁺ replace the Al³⁺ in AlBr₃·6H₂O crystals.

Keywords: AlBr₃·6H₂O:Cr³⁺ spin-orbit coupling electron paramagnetic resonance(EPR) crystal field structure

收稿日期 1900-01-01 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期 2006-10-24

DOI:

基金项目:

通讯作者: 王敏杰

作者简介:

本刊中的类似文章

Copyright 2008 by 山东大学学报(理学版)

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(OKB)

[HTML全文](OKB)

参考文献[PDF]

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ AlBr₃·6H₂O: Cr³⁺
- ▶ 自旋轨道耦合
- ▶ 电子顺磁共振(EPR)
- ▶ 晶场结构

本文作者相关文章

- ▶ 王敏杰
- ▶ 朱连轩*
- ▶ 林爱英