

Ni²⁺掺杂到氟化物钙钛矿中的局域结构畸变和基态分裂的理论研究

Theoretical Investigations of the Local Structure Distortion and EPR Parameter for Ni²⁺-doped Perovskite Fluorides

摘要点击 338 全文点击 107 投稿时间: 2010-11-25 采用时间: 2011-2-14

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/02/167-172

中文关键词 [完全能量矩阵](#) [双自旋轨道耦合系数模型](#) [局域结构畸变](#)

英文关键词 [Complete energy matrix](#) [Double spin-orbit coupling parameter model](#) [Local structure distortion](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
曹喜民	四川大学原子与分子物理研究所, 成都610064	
邝小渝*	四川大学原子与分子物理研究所, 成都610064 ; 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳110016	scu_kxy@163.com
李成刚	四川大学原子与分子物理研究所, 成都610064	
柴瑞鹏	四川大学原子与分子物理研究所, 成都610064	

中文摘要

基于双自旋轨道耦合系数模型并结合完全能量矩阵的方法, 研究了AMF₃ (A=K, Rb; M=Zn, Cd, Ca):Ni²⁺和K₂ZnF₄:Ni²⁺体系中Ni²⁺的基态分裂和局域结构. 通过模拟光谱和电子顺磁共振(EPR)谱, 结果显示在研究氟化物络合分子的能级精细结构和局域结构畸变时, 配体F⁻对体系的自旋轨道耦合机理的影响不可忽略, 同时讨论了EPR参量随夹角、自旋轨道耦合、平均参量以及偏离参量的变化规律.

英文摘要

By analyzing the optical spectra and electron paramagnetic resonance parameter D, the local structure distortion of (NiF₆)⁴⁻ clusters in AMF₃ (A=K, Rb; M=Zn, Cd, Ca) and K₂ZnF₄ series are studied using the complete energy matrix based on the double spin-orbit coupling parameter model for configuration ions in a tetragonal ligand field. The results indicate that the contribution of ligand to spin-orbit coupling interaction should be considered for our studied systems. Moreover, the relationships between D and the spin-orbit coupling coefficients as well as the average parameter and the divergent parameter are discussed.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计