

三角对称晶场中 ${}^4A_2(3d^3)$ 态离子 EPR 参量的 SS 和 SOO 机制*

杨子元^{a, b, **}, 魏 群^b

(a. 西安电子科技大学微电子所, 西安 710071; b. 宝鸡文理学院物理系, 宝鸡 721007)

摘 要: 考虑了在以前工作中被忽略的自旋与自旋(Spin-spin(SS))磁相互作用以及一个电子自旋与另外电子轨道(Spin-other-orbit(SOO))之间的磁相互作用,用 Visual Basic6.0 设计了新的 CDM/EPR 计算程序. 该程序不仅能计算 ${}^4A_2(3d^3)$ 态离子在晶体中的 EPR 参量,而且能计算体系的光谱精细结构. 利用该程序研究了红宝石晶体与绿宝石晶体的 EPR 参量与光谱精细结构,理论与实验符合甚好. 在此基础上,研究了 SS 与 SOO 磁相互作用对 EPR 参量及其光谱的贡献. 发现在磁相互作用的三个部分中, EPR 参量的主要来源是旋-轨(Spin-orbit(SO))耦合相互作用; SS 磁相互作用对零场分裂(Zero-field splitting(ZFS))参量 D 具有重要贡献,在研究中不能被忽略,而 SOO 磁相互作用对 ZFS 参量 D 的贡献较小; SS 与 SOO 磁相互作用对 Zeeman g 因子以及光谱的贡献甚微.

关键词: EPR 参量; SS 磁相互作用; SOO 磁相互作用; 红宝石; 绿宝石

中图分类号: O734.3, O737 文献标识码: A

SS and SOO Mechanisms of the EPR Parameters for ${}^4A_2(3d^3)$ State Ion in Trigonal Symmetry Crystal Field *

Yang Ziyuan^{a, b, **}, Wei Qun^b

(a. Microelectronics Institute, Xidian University, Xi'an 710071;

b. Department of Physics, Baoji University of Arts and Science, Baoji 721007)

Abstract A CDM/EPR program has been developed using Visual Basic 6.0. The spin-spin(SS) and spin-other-orbit(SOO) interactions omitted in published works have also been included in the Hamiltonian. The CDM/EPR program can study not only the EPR parameters but also the CF energy levels and wavefunctions for ${}^4A_2(3d^3)$ states ions in crystals. Utilizing the CDM/EPR program, the EPR parameters and fine spectra for Ruby and Emerald have been investigated. The theoretical results are in good agreement with the experimental findings. The contributions to the EPR parameters and fine spectra arising from SS and SOO interactions have been studied. The investigation shows: ① The EPR parameters are mainly induced by SO coupling interaction; ② The contribution to the zero-field-splitting(ZFS) arising from SS interaction is appreciable and cannot be omitted, whereas the contributions to the ZFS parameter D arising from SOO interaction are smaller; ③ The contribution to the Zeeman g -factors and spectra arising from SS and SOO interactions is slight.

Keywords EPR parameter, Spin-spin interaction, Spin-other-orbit interaction, Ruby, Emerald

* Project supported by the Education Department Natural Science Foundation of Shanxi Province(02JK045) and by Baoji University of Arts and Science Key Research Foundation.

** Corresponding author, E-mail: yziyuan@tom.com Received 13 May 2003; in final form 3 September 2003.

1 引言

EPR(Electron Paramagnetic Resonance)参量是描述电子顺磁共振最基本的物理参量^[1-3]. 由于这些参量随晶体微观结构的变化非常敏感,因此,对这些参量的研究能提供晶体材料磁学、光学、微观结构、相变、高压等大量微观信息. 近年来,对这些参量的研究引起了国内外学者的极大兴趣^[4-10]. Macfarlane 考虑了 $^4A_2(3d^3)$ 态离子的部分微观态^[11,12],在仅仅考虑了旋-轨耦合(Spin-Orbit(SO))作用下,利用微扰环方法建立了 $^4A_2(3d^3)$ 态离子的 EPR 参量近似三阶微扰理论,他的理论因为解析公式的简洁得到了许多研究者的引用^[13,14]. 但一些研究表明, Macfarlane 理论在一些情况下难以收敛^[15,16]. 近年来,随着计算机技术的发展,一种新的 CDM(Complete Diagonalization Method)方法为许多研究者所采用^[16-21]. 众所周知, EPR 参量是磁相互作用与低对称晶体场联合作用的结果. 一般情况下,磁相互作用包括旋-轨(SO)耦合作用,自旋与自旋(SS)之间相互作用(Spin-spin (SS) interaction)以及一个电子的自旋与另外一个电子轨道之间的相互作用(Spin-other-orbit (SOO) interaction)^[22,23]. 以前的多数研究仅仅考虑了 SO 作用对 EPR 参量的贡献. 最近,张廷蓉考虑了 SS 机制研究了 $^4A_2(3d^3)$ 态离子的 EPR 参量^[24]. 另一方面,人们对 $^5D(3d^6/4)$ 态离子^[25,26]及 $^3A_2(3d^{2/8})$ ^[27]的研究表明, SS 作用对 EPR 参量的贡献是不可忽略的. 1998 年,杨子元等研究了 $^4A_2(3d^{3/7})$ 态离子的 EPR 参量^[28],并按照 CDM 方法利用 Fortran 语言设计了 CDM/EPR 计算程序,该程序不仅能计算体系的光谱而且能获得体系的 EPR 参量. 为了更为科学系统地研究 SS 与 SOO 相互作用对 EPR 参量的贡献. 最近,我们设计了一个新的 CDM/EPR 计算程序,本工作利用该程序,对典型的绿宝石与红宝石晶体的 EPR 参量与吸收光谱进行了系统的研究. 理论计算与实验测量符合甚好.

2 CDM/EPR 的理论背景

2.1 体系 Hamiltonian

在晶体场理论体系中^[2,29]研究 $^4A_2(3d^3)$ 态离子的 EPR 参量及其体系光谱精细结构所需的 Hamiltonian 为:

$$H = H_{ec}(B, C) + H_{CF}(B_{kq}) + H_{SO}(\zeta_d) + H_{SS}(M_0, M_2) + H_{SOO}(M_0, M_2) + H_{Tree}(\alpha) \quad (1)$$

其中, H_{ec} 为价电子间静电的库仑作用势; B, C 为 Racah 静电参量; H_{CF} 为晶场作用; B_{kq} 为晶场参量, 在三角对称(C_{3v}, D_3, D_{3d})下非零的晶场参量为 B_{20}, B_{40} 和 B_{43} ; H_{SO} 为自旋-轨道耦合作用; ζ_d 为耦合系数; H_{SS} 是 SS 耦合作用; H_{SOO} 为 SOO 耦合作用; M_0, M_2 为耦合参量^[30]; $H_{Tree}(\alpha)$ 为 Trees 修正^[31].

在中间场耦合图像中^[16,28,32],我们构造了 $3d^3$ 态离子在三角对称晶场中的完全能量矩阵.(1)式中 H_{ec}, H_{SO} 和 H_{CF} 矩阵元的计算方法已经在文献^[16,21,28]中作了描述. 这里我们仅仅提供 H_{SS} 与 H_{SOO} 矩阵元的计算公式.

按照 Horie 的方法^[33], H_{SOO} 能够分为两个部分,即

$$H_{SOO} = H_{SOO}^I + H_{SOO}^{II} \quad (2)$$

在式(2)中, H_{SOO}^I 的作用和通常的旋-轨耦合作用非常相似,通常的处理方法是将 H_{SOO}^I 与通常的旋-轨耦合作用合并在一起^[33]. 在实际计算中,对于 $^4A_2(3d^3)$ 态离子就是将通常的 SO 耦合参数 ζ_d 用参数 ζ' 替代,也就是:

$$\zeta' = \zeta_d - 21M_0 + 42M_2 \quad (3)$$

利用 Wigner 定理和 Racah 不可约张量算符技术, H_{SS} 与 H_{SOO} 的矩阵元可用 $3j$ 符号表示为^[27]:

$$\begin{aligned} & \alpha L S M_L M_S | H_{SS} | \alpha' L' S' M_L' M_S' \\ & = (-1)^{L-M_L+S-M_S} \alpha L S \parallel T^{(22)} \parallel \alpha' L' S' \times \\ & \sum_{q=-2}^{q=+2} (-1)^q \begin{pmatrix} S & 2 & S' \\ -M_S & q & M_S' \end{pmatrix} \times \\ & \begin{pmatrix} L & 2 & L' \\ -M_L & -q & M_L' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \alpha L S M_L M_S | H_{SOO}^{II} | \alpha' L' S' M_L' M_S' \\ & = (-1)^{L-M_L+S-M_S} \alpha L S \parallel T^{(11)} \parallel \alpha' L' S' \times \\ & \sum_{q=-1}^{q=+1} (-1)^q \begin{pmatrix} S & 1 & S' \\ -M_S & q & M_S' \end{pmatrix} \times \\ & \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ -M_L & -q & M_L' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5)$$

其中约化矩阵元 $\alpha L S \parallel T^{(22)} \parallel \alpha' L' S'$ 和 $\alpha L S \parallel T^{(11)} \parallel \alpha' L' S'$ 可在文献 [33, 34] 中查得.

本研究考虑了 $^4A_2(3d^3)$ 态离子的所有 120 个微观态,建立的能量矩阵为 120×120 阶矩阵. 按群表示理论,能量矩阵可约化为一个(42×42)阶和两个(39×39)阶矩阵,其中在无外磁场的作用下,两

个 (39×39) 阶矩阵的本征值是简并的. 获得的完全能量矩阵均是 Racah 静电参量 B 、 C 、晶场参量 B_{20} 、 B_{40} 、 B_{43} 、旋-轨耦合参量 ζ_d 、SS 和 SOO 磁作用参数 M_0 、 M_2 的函数. 将这些参量代入能量矩阵, 对角化能量矩阵, 就可计算出体系能级的精细结构分裂及其对应的全组态混合本征矢. 其基态混合本征矢可用于基态 Zeeman g 因子的计算.

2.2 EPR 参量

对于 $3d^3$ 电子组态, 基态 $^4A_2(^4F)$ 是轨道单态, 在三角对称 (C_{3v} , D_3 , D_{3d}) 晶场与磁相互作用联合作用下 (包括 SO、SS、SOO), $^4A_2(^4F)$ 态分裂成间隔为 $2D = ^4A_2(2\bar{A}) - ^4A_2(\bar{E})$ 的两个能级, 第一激发态 $^2E(^2G)$ 则分裂间隔为 $\chi(^2E) = ^2E(\bar{E}) - ^2E(2\bar{A})$ 的两个能级^[11]. 利用自旋 Hamiltonian 理论^[2, 8, 35, 36], 可以得到基态 ZFS 参量 D 以及 Zeeman g 因子 $g_{//}$ 与 g_{\perp} 的表示式^[6, 16].

为了研究的方便, 在 CDM/EPR 程序中, 我们使用了晶场参量 B_{20} 、 B_{40} 、 B_{43} 与纯三角低对称晶场参量 V 、 V' 以及立方晶场参量 Dq 之间关系式^[12, 21, 37].

3 $^4A_2(3d^3)$ 态离子 EPR 参量的 SS 和 SOO 机制

3.1 红宝石与绿宝石 EPR 参量及其光谱精细结构

众所周知, EPR 参量是低对称晶场与磁相互作用 (包括 SO、SS 和 SOO) 联合作用的结果, 二者缺一不可. 为具普遍性, 我们选择了典型的绿宝石晶体 ($Cr^{3+} : Be_3Al_2(SiO_3)_6$) 与红宝石 ($Cr^{3+} : Al_2O_3$) 晶体材料. 这两种晶体材料都是非常重要的激光材料, 人们从实验和理论两个方面对这两个晶体都做了大量研究^[38-43]. 本工作考虑 SS 与 SOO 磁作用的贡献, 对两种材料的 EPR 参量及其精细光谱进行了系统

的研究.

在绿宝石与红宝石晶体材料中, 当 Cr^{3+} 掺入基质晶体后, 它们都替代了基质中的 Al^{3+} , 激活离子 Cr^{3+} 被位于畸变八面体顶点上的六个 O^{2-} 配体包围, 其中心激活离子 Cr^{3+} 具有相似的晶场环境, 都属于三角对称. 绿宝石属 D_3 点群对称, 而红宝石属 C_3 点群对称, 由于红宝石晶体的畸变角非常之小 ($\varphi = 2.15^\circ$)^[44], 通常按 C_{3v} 作近似处理^[12]. 这两种晶体材料的立方晶场参量 Dq 、Racah 参量 B 、 C 、SO 耦合参数 ζ_d 都已经被获得^[12]. 对于自由的 Cr^{3+} , SS 与 SOO 磁作用参数 $M_{0F} = 0.2021 \text{ cm}^{-1}$, $M_{2F} = 0.0159 \text{ cm}^{-1}$ ^[45]. 考虑到 Cr^{3+} 在晶体中的共价缩减效应^[12], 利用近似关系 $M_0 \approx k^2 M_{0F}$, $M_2 \approx k^2 M_{2F}$ (这里 k 是轨道缩减因子, 计算中用了 $k = 0.7$ ^[12]) 得到 $M_0 = 0.0990 \text{ cm}^{-1}$, $M_2 = 0.0078 \text{ cm}^{-1}$. 获得上面这些参量后, 我们通过用两个纯三角对称晶场参量 V 、 V' 拟合了两种晶体材料的 EPR 参量, 获得:

$$V = 593 \text{ cm}^{-1}, V' = 636 \text{ cm}^{-1} \quad (\text{红宝石}) \quad (6)$$

$$V = -1944 \text{ cm}^{-1}, V' = 1785 \text{ cm}^{-1} \quad (\text{绿宝石}) \quad (7)$$

两种晶体材料 EPR 参量理论与实验的比较列在表 1 与表 2 中. 从表 1 与表 2 可以看到, 理论与实验测量符合很好. 利用我们获得的参量, 我们计算了两种晶体材料的精细光谱, 理论与实验的比较列在表 3 中. 理论与实验结果的一致表明我们采用的拟合参量是合理的.

3.2 分析与讨论

从表 1 与表 2 可以看出, SO 耦合作用对 EPR 参量的贡献是最为主要的, SS 磁作用和 SOO 磁作用对红宝石和绿宝石晶体的基态零场分裂 D 、Zeeman g 因子及 2E 态零场分裂均有不同程度的贡献. 从表 1 与表 2 的计算结果中我们发现: ① 对于

表 1 红宝石的 EPR 参量及其 2E 态的零场分裂

Table 1 The EPR parameters and the ZFS of 2E state for Ruby

Parameters	Calculated in this work				Observed ^[12]
	A	B	C	D	
D/cm^{-1}	-0.1496	-0.1935	-0.1476	-0.1915	-0.1915
$g_{//}$	1.9830	1.9830	1.9840	1.9840	1.9840
g_{\perp}	1.9838	1.9838	1.9847	1.9847	1.9867
$\chi(^2E)/\text{cm}^{-1}$	-27.74	-27.75	-29.57	-29.59	-29.6

A. With only SO interaction. B. With SO and SS interactions.

C. With SO and SOO interactions. D. With SO, SS and SOO interactions.

表 2 绿宝石的 EPR 参量及其 2E 态的零场分裂Table 2 The EPR parameters and the ZFS of 2E state for Emerald

Parameters	Calculated in this work				Observed ^[12,41,42]
	A	B	C	D	
D/cm^{-1}	-0.7871	-0.9101	-0.7655	-0.8884	-0.89
$g_{//}$	1.9724	1.9724	1.9736	1.9737	1.973 ± 0.003
g_{\perp}	1.9782	1.9782	1.9792	1.9792	1.97 ± 0.01
$\alpha(^2E)/\text{cm}^{-1}$	63.28	63.32	62.96	63.01	63

A. With only SO interaction. B. With SO and SS interactions.

C. With SO and SOO interactions. D. With SO, SS and SOO interactions.

表 3 红宝石与绿宝石光谱的精细结构(cm^{-1})Table 3 The fine spectrum structures of Ruby and Emerald(cm^{-1})

Transitions $^4A_2(^4A_{2g}, ^4F) \rightarrow$	Ruby		Transitions $^4A_2(^4A_{2g}, ^4F) \rightarrow$	Emerald	
	Calculated	Observed ^[40]		Calculated	Observed ^[41]
$^4A_2(^4A_{2g}, ^4F)$	0.3829	0.3831	$^4A_2(^4A_{2g}, ^4F)$	1.7767	1.78
$^2E(^2E_g, ^2G)$	14593	14418	$^2E(^2E_g, ^2G)$	14799	14655
$^2E(^2E_g, ^2G)$	14622	14447	$^2E(^2E_g, ^2G)$	14862	14717
$^4A_2(^4A_{2g}, ^4F)$	15137	14957	$^4A_1(^4T_{2g}, ^4F)$	15762	15700
$^2E(^2T_{1g}, ^2H)$	15271	15168	$^4E(^4T_{2g}, ^4F)$	16742	16800
$^2E(^2T_{1g}, ^2H)$	15288	15190	$^2E(^4T_{2g}, ^2D)$	21459	21037
$^4E(^4T_{2g}, ^4F)$	18012	18000	$^4E(^4T_{1g}, ^4F)$	23015	23000
$^4A_2(^4T_{2g}, ^4F)$	18348	18400	$^4A_2(^4T_{1g}, ^4F)$	24504	24000
$^2E(^2T_{2g}, ^2H)$	21750	20993	$^2A_1(^2T_{2g}, ^2G)$	30839	30700
$^2E(^2T_{2g}, ^2H)$	21849	21068	$^2E(^2T_{1g}, ^2G)$	32066	31650
$^2A_2(^2T_{2g}, ^2H)$	22211	21357	$^2E(^2T_{1g}, ^2H)$	36827	36300
$^4E(^4T_{1g}, ^4P)$	24116	24300	$^2A_2(^2T_{1g}, ^2P)$	36907	37400
$^4A_2(^4T_{1g}, ^4P)$	25060	25100	$^2E(^2T_{1g}, ^2F)$	41713	39900
$^2A_1(^2A_{1g}, ^2G)$	30647	29425	$^2A_2(^2A_{2g}, ^2F)$	43515	41800
$^2E(^2T_{1g}, ^2G)$	32713	32500			
$^2E(^2T_{1g}, ^2G)$	32780	32550			
$^2E(^2T_{1g}, ^2H)$	37398	36700			
$^2E(^2T_{1g}, ^2H)$	37430	37100			
$^4A_2(^4T_{1g}, ^4P)$	38991	39000			
$^2A_1(^2T_{1g}, ^2F)$	41274	41100			
$^2A_2(^2T_{1g}, ^2F)$	43100	41894			
Spectra parameters	$B = 650, C = 3120, \zeta_d = 180, \alpha = 70$				
			$B = 780, C = 2960, \zeta_d = 225, \alpha = 70$		

红宝石晶体, SO 对基态 D 的贡献为 78.12%, SS 对基态 D 的贡献为 22.92%, 而 SOO 磁相互作用对 D 的贡献约为 -1.04%; ② 对于绿宝石晶体, SO 对

D 的贡献为 88.59%, SS 对 D 的贡献为 13.84%, 而 SOO 磁相互作用对 D 的贡献约为 -2.43%; ③ 对于两种晶体材料, Zeeman g 因子主要来自 SO 耦合

作用,SS 对 g 因子几乎没有贡献,SOO 则对 g 因子有微小的贡献(也不足千分之一);④对于两种晶体材料,SO 与 SS 对 D 的贡献为负值,而 SOO 对 D 的贡献为正值,同时,SS 对 D 贡献的绝对大小远大于 SOO 对 D 贡献的绝对大小.这可能是由于两种晶体材料中激活离子 Cr^{3+} 具有相似的晶场环境所致;⑤对两种晶体材料光谱的精细结构研究表明,SS 作用和 SOO 作用对精细光谱的贡献甚微.

另外,对于绿宝石晶体材料,实验测量获得^[12]:
 $g_{//} = 1.973 \pm 0.003$, $g_{\perp} = 1.97 \pm 0.01$. 由于 $g_{//}$ 测量的有效数字的位数为 3 位,而 g_{\perp} 的有效位数是 2 位.因此,我们无法从实验数据判断是 $g_{//} > g_{\perp}$ 还是 $g_{//} < g_{\perp}$. 我们的理论则确定了 $g_{//} < g_{\perp}$. 在文献[46]中曾给出了基态零场分裂参量 D 和 g 因子之间关系的近似公式,即:

$$D \approx \frac{1}{6} \zeta_0 (g_{//} - g_{\perp})$$

从这个公式可以看到,当 $D < 0$ 时, $g_{//} < g_{\perp}$; 当 $D > 0$ 时, $g_{//} > g_{\perp}$. 对绿宝石晶体, $D < 0$, 所以 $g_{//} < g_{\perp}$. 本工作的计算结果和这一结论是一致的.

4 结 论

本工作在考虑 SS 与 SOO 磁相互作用的情况下,研究了红宝石与绿宝石晶体材料的电子光谱以及 EPR 参量,理论与实验符合很好.在此基础上,研究了 SO、SS 以及 SOO 对 EPR 参量的贡献大小,我们获得以下结论:

1. 在磁相互作用的三个部分中(包括 SO、SS 以及 SOO 相互作用),EPR 参量的主要来源是 SO 相互作用;

2. SS 磁相互作用对零场分裂参量 D 具有重要贡献,SOO 磁相互作用对零场分裂参量 D 的贡献则较小,而 SS 与 SOO 对 g 因子几乎没有影响,所以在研究基态零场分裂时不可忽略,但在研究 g 因子时可以不考虑;

3. SOO 磁相互作用对基态零场分裂参量 D 的贡献的绝对值远小于 SS 作用对基态零场分裂参量 D 的贡献;

4. SS 与 SOO 磁相互作用对光谱的贡献甚微;

5. 验证了当 $D < 0$ 时 $g_{//} < g_{\perp}$ 这一关系的正确性,并由此确定了绿宝石实验无法确定的 $g_{//}$ 与 g_{\perp} 之间的大小关系.

参 考 文 献

- [1] Pilbrow J R. Transition Ion Electron Paramagnetic Resonance, Clarendon Press, Oxford, 1990.
- [2] Newman D J, Ng B. Crystal. Field Handbook, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [3] Abragam A, Bleaney B. Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Clarendon Press, Oxford, 1970; Dover, New York, 1986.
- [4] Ma D P, Ma X D, Chen J R, Liu Y Y. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**: 1780
- [5] Zhou Y Y, Li C L. *Phys. Rev. B*, 1993, **57**: 16489
- [6] Yang Z Y, Rudowicz C, Qin J. *Physica B*, 2002, **318**: 188
- [7] Rudowicz C, Sung H W F. *Physica B*, 2001, **300**: 1
- [8] Rudowicz C, Misra S K. *Appl. Spectr. Rev.*, 2001, **36**: 11
- [9] Zhou Y Y, Li C L. *Phys. Rev. B*, 1993, **57**: 16489
- [10] Yeom T H, Choh S H, Chang Y M, Rudowicz C. *Phys. Status Solidi (b)*, 1994, **185**: 417
- [11] Macfarlane R M. *J. Chem. Phys.*, 1967, **47**: 2066
- [12] Macfarlane R M. *Phys. Rev.*, 1970, **B1**: 989
- [13] Han K T, Kim J. *Solid State Commun.*, 1997, **102**: 467
- [14] Zheng W C, Wu S Y. *Physica B*, 1999, **271**: 252
- [15] Chang Y M, Yeom T H, Yeung Y Y, Rudowicz C. *J. Phys. : Condens. Matter.*, 1993, **5**: 6221
- [16] Yang Ziyuan(杨子元). *Chin. J. Chem. Phys.*(化学物理学报), 2000, **13**: 190
- [17] Xia Shangda(夏上达), Liu Shiyu(刘世宇). *Chinese Science*(中国科学), 1989, **11**: 1152
- [18] Yeung Y Y, Rudowicz C. *Computers and Chemistry*, 1992, **16**: 207
- [19] Yu W L. *Phys. Rev. B*, 1995, **52**: 4237
- [20] Zhou Yiyang(周一阳). *Chin. J. Chem. Phys.*(化学物理学报), 2002, **15**: 401
- [21] Yang Z Y. *Appl. Magn. Reson.*, 2000, **18**: 455
- [22] Blume M, Watson R E. *Proc. Roy. Soc. (London) A*, 1963, **271**: 565
- [23] Blume M, Watson R E. *Proc. Roy. Soc. (London) A*, 1962, **270**: 127
- [24] Zhang Tingrong(张廷蓉). *J. Sichuan Normal University*(四川师范大学学报), 1997, **20**: 78
- [25] Rudowicz C, Zhou Y Y. *J. Phys. Chem. Solids*, 1996, **57**: 1191
- [26] Zhou Yiyang(周一阳). *Acta Phys. Sinica*(物理学报), 1995, **44**: 121
- [27] Rudowicz C, Yang Z Y, Yeung Y Y, Qin J. *J. Phys. Chem. Solids*, 2003, **318**: 1419

- [28] Yang Ziyuan (杨子元), Yu Wanlun (余万伦). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1998 , **11** : 422
- [29] Xia Shangda (夏上达). *Group Theory and Spectrum (群论与光谱)*, Beijing (北京): Science Press (科学出版社), 1994.
- [30] Marvin H H. *Phys. Rev.* , 1947 , **71** : 102
- [31] Trees R E. *Phys. Rev.* , 1952 , **85** : 381
- [32] Yu W L , Zhang X M , Yang L X , Zen B Q. *Phys. Rev. B* , 1994 , **50** : 6756
- [33] Horie H. *Prog. Theor. Phys.* , 1953 , **10** : 296
- [34] Trees R E. *Phys. Rev.* , 1953 , **10** : 296
- [35] Mabbs F E , Collison D. *Electron Paramagnetic Resonance of d Transition Metal Compounds* , Elsevier , Amsterdam-London-New York , 1992
- [36] Rudowicz C. *Magn. Reson. Rev.* , 1986 , **13** : 1
- [37] Morrison C A , *Crystal Fields for Transition-Metal Ions in Laser Host Materials* , Springer-Verlag , Berlin , 1992.
- [38] Vink A P , Meijerink A. *Spectr. Acta. Part A* , 1998 , **54** : 1775
- [39] Ma D P , Liu Y Y , Ma L , Chen J R. *J. Chem. Phys. Solids* , 2000 , **61** : 799
- [40] Fairbank W M , Klauminzer G K , Schawlow A L. *Phys. Rev. B* , 1975 , **11** : 60
- [41] Wood D J. *J. Chem. Phys.* , 1965 , **42** : 3404
- [42] Yang Ziyuan (杨子元). *Chin. J. Quan. Elec.* (量子电子学报) , 1999 , **16** : 243
- [43] Yang Ziyuan (杨子元). *Chin. J. Quan. Elec.* (量子电子学报) , 2000 , **17** : 293
- [44] Glass A M. *J. Chem. Phys.* , 1969 , **50** : 1501
- [45] Fraga S , Karwowski J , Saxena K M S. *Handbook of Atomic Data* , Elsevier Scientific Publishing company , Amsterdam-Oxford-New York , 1976.
- [46] Patel J L , Davics J J , Cavenett B C , Takeuchi H , Horai K. *J. Phys. Solid States Phys.* , 1976 , **9** : 129