

<<晶体场手册>>

图书基本信息

## <<晶体场手册>>

### 内容概要

《晶体场手册》以对晶体场现代概念的理解为基础，澄清了在历史上产生混淆的一些问题，尤其是关于磁性离子能级光谱的共价效应、配位体极化效应方面的问题。

对固体中磁性离子能级光谱的唯象分析，提供了清晰的指导和一套计算机程序，向读者说明了如何用不同层次参数化模型来从观测光谱中获得尽可能多的信息。特别地，详细阐述了叠加模型和跃迁强度的参数化以及当标准（单电子）晶体场参数化不成功时所要使用的方法。

这是第一本把全部参数化模型、概念和使用它们所需的计算手段统而述之的晶体场理论著作，对光电子系统和磁性材料方面的研究生和研究人员特别有益。

<<晶体场手册>>

作者简介

张庆礼，2001.4至今在中科院安光机所工作，于2002.9被聘为副研究员，2005年至今任晶体材料研究室主任。

在国内外期刊发表论文十余篇。

## &lt;&lt;晶体场手册&gt;&gt;

## 书籍目录

译者序

前言

引言

第1章 晶体场分裂机制

1.1 作为开壳层态自由离子微扰的晶体场

1.2 静电型晶体场模型

1.3 其他对有效电势的贡献

1.4 多电子矩阵元形式的晶体场能量

1.5 单电子矩阵元表示的晶体场能量

1.6 晶体场计算的多体方法

1.7 与其他公式的关系

1.8 与能带论中紧束缚模型的关系

1.9 数值结果

1.10 总结

第2章 经验晶体场

2.1 磁性离子光谱及能级

2.2 唯象晶体场参数化

2.3 从实验上确定晶体场参数

2.4 镧系和铜系晶体场参数

第3章 晶体场参数拟合

3.1 从晶体场参数确定晶体场分裂

3.2 镧系和铜系中多重能级的晶体场参数拟合

第4章 镧系和铜系光学光谱

4.1 哈密顿量

4.2 矩阵元的约化和赋值

4.3 物理参数值的设定方法

4.4 晶体场参数的实验确定

4.5 镧系和铜系的对比

第5章 叠加模型

5.1 基本考虑事项

5.2 固有参数值

5.3 组合坐标因子

5.4 由唯象晶体场参数确定固有参数

5.5 应力引起的晶体结构变化

5.6 固有参数的分析与解释

5.7 叠加模型的价值及其局限性评估

第6章 电子关联对晶体场分裂的影响

6.1 单电子晶体场模型的般化

6.2 晶体场概念的一般化

6.3 全参数化

6.4 参数拟合

6.5 发展趋势

第7章 S态离子基态分裂

7.1 自旋哈密顿

7.2 实验结果

## &lt;&lt;晶体场手册&gt;&gt;

- 7.3 晶体场和自旋哈密顿参数间的关系
- 7.4 叠加模型
- 7.5 零场分裂机制
- 7.6 展望
- 第8章 不变量和矩量
- 8.1 矩量和转动不变量间的关系
- 8.2 二次旋转不变量和叠加模型
- 8.3 应用举例
- 8.4 展望
- 第9章 半经典模型
- 9.1 介绍性例子
- 9.2 八配位立方格位处的隧道效应
- 9.3 展望
- 第10章 跃迁强度
- 10.1 基本方面
- 10.2 宇称禁戒跃迁
- 10.3 叠加模型
- 10.4 唯象处理
- 10.5 从头计算
- 10.6 高阶效应
- 10.7 相关主题
- 10.8 展望
- 附录1 点对称性
- A1.1 全旋转群 $O_3$ 和自由磁性离子态
- A1.2 格位对称和对称算符
- A1.3 晶体场参数和点对称
- A1.4 点对称群的不可约表示和能级
- A1.5 约化和诱导表示
- 附录2 QBASIC程序
- A2.1  $3j$ 和 $6j$ 符号的计算
- A2.2 坐标因子的计算
- A2.3 数据文件的结构和命名
- 附录3 可获取的程序包
- A3.1  $3dN$ 离子晶体场分析计算程序包
- A3.2 从光谱强度确定晶体场和强度
- A3.3 从非弹性中子散射确定晶体场
- A3.4 计算立方对称格点能级图的Mathematica程序
- 附录4 计算程序包CsT
- A4.1 晶体场和零场分裂哈密顿性质
- A4.2 程序包的结构和功能
- A4.3 总结和结论
- 参考文献
- 索引

## &lt;&lt;晶体场手册&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：1.2 静电型晶体场模型 历史上，曾假设除所考虑的磁性离子外，把晶体中所有的其他离子简单地处理为静电场的源，这是离子晶体中晶体场的第一个近似。

在这种所谓的静电晶体场模型中，假设磁性离子壳层中的每个电子都独立地在静电势下运动，各向异性项由周围的晶体产生。

已证明这种模型是不正确的，本章中大部分内容是用来说明为什么如此。

然而，静电模型在主题文献中是如此根深蒂固，用它作为目前讨论的开始是很好的。

1.2.1 静电模型的定量发展 静电模型最简单的形式是点电荷模型。

在此模型中，一个磁性离子处的静电势是通过晶格中所有其他离子（被认为是点电荷）的贡献直接相加而得到的，这样做的物理理由是：任何外部具有球对称性的电荷分布的静电势与处于其电荷分布中心一个点的等同净电荷产生的静电势是一样的。

因此，点电荷模型中的内在近似是在磁性离子上的壳层电子位于近邻离子的电荷分布之外。

尽管这种近似非常粗糙，但是，至少在离子晶体情形下，它总是能预测符号正确的晶体场参数，从此意义上讲，简单点电荷模型是成功的。

这和壳层电子间由相邻离子所携带的负电荷所产生的排斥作用是一致的。

可证明对静电势的 $k$ 阶点电荷作用有简单的函数依赖 $1/R^{k+1}$ ，这里 $R$ 为点电荷到磁性离子中心的距离

。这种距离的依赖性（尤其 $k=2$ 的情况下）预期会导致晶体中远距离离子对静电势有重要贡献。

由于在点电荷晶格求和中，正负相消很强，因此必须用十分复杂的方法来得到可靠的结果。

尽管可以解决精确计算波函数和晶格求和时的困难，但所得结果仍然是基于点电荷模型中让人怀疑的内在假设。

经验证明，无论怎么努力改善它们的精度，这种计算也不会得到和实验上所观察到的晶体场分裂一样的结果。

典型地，对镧系离子，2阶作用高估到了10倍，6阶作用则低估了相似的倍数。

改进点电荷模型的早期尝试（见[HR63]）主要集中在考虑晶体中的离子电荷没有精确的球对称分布上

。曾提出在点电荷分布之外，来自于作用在离子上的感应（点）电偶极矩和电四极矩的静电作用也应该包含在晶格求和中。

然而，这些改进并没有提高与实验的吻合性，上面提到的总的误差仍保持不变。

在镧系和钪系晶体场的静电模型中，对2阶晶体场的过高估计在很大程度上可以归因于忽略了在部分填充的 $Nf$ 壳层外的 $(N+1)S2P6$ 满壳层电子的屏蔽效应。

实际上，对外壳层电子的激发改变了壳层电子所能感受到的外面产生的静电场。

这种屏蔽作用可以通过乘以屏蔽因子（表示为 $(1-k)$ ）而归入静电点电荷模型。

已做了数种尝试来计算屏蔽因子，发现它小于单位1，这与直观感觉一致。

对于三价的镧系离子， $k_4$ 和 $k_6$ 都很小，但计算出的 $k_2$ 约为0.7（见[SBP68]）。

显然，这在计算2阶静电作用时有重要的作用。

## <<晶体场手册>>

### 编辑推荐

《晶体场手册》是第一本把全部参数化模型、概念和使用它们所需的计算手段统而述之的晶体场理论著作，对光电子系统和磁性材料方面的研究生和研究人员特别有益。

<<晶体场手册>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>