

Казанский государственный университет

**М.М. ЗАРИПОВ**

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ СПЕКТРОВ  
ЭЛЕКТРОННОГО  
ПАРАМАГНИТНОГО  
РЕЗОНАНСА В КРИСТАЛЛАХ**

**Казанский государственный университет**

**М.М.ЗАРИПОВ**

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ СПЕКТРОВ  
ЭЛЕКТРОННОГО ПАРАМАГНИТНОГО  
РЕЗОНАНСА В КРИСТАЛЛАХ**

**Курс лекций**



**КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
2009**

УДК 538.9  
ББК 22.37  
3 34

*Печатается по рекомендации  
Редакционно-издательского совета  
физического факультета  
Казанского государственного университета*

**Научные редакторы:**

доктор физико-математических наук, профессор **М.С.Тагиров**;  
кандидат физико-математических наук, доцент **А.Л.Ларионов**

**Рецензенты:**

доктор физико-математических наук, профессор КГУ **Б.З.Малкин**;  
доктор физико-математических наук, профессор КГТУ (КХТИ) **В.А.Жихарев**

**Зарипов М.М.**

**3 34 Основы теории спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах:** курс лекций. – Казань: Казан. гос. ун-т, 2009. – 212 с.

**ISBN 978-5-98180-707-7**

Курс лекций содержит систематическое изложение теории спектров ЭПР ионов группы железа в диэлектрических кристаллах, основанной на концепции спинового гамильтониана.

Предназначено для студентов, магистрантов и аспирантов естественно-научных факультетов университетов, а также для специалистов, исследующих ЭПР в твердых телах.

УДК 538.9  
ББК 22.37

**ISBN 978-5-98180-707-7**

© Зарипов М.М., 2009;  
© Казанский государственный университет, 2009

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|  |     |
|--|-----|
| ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА .....   | 3   |
| ПРЕДИСЛОВИЕ НАУЧНЫХ РЕДАКТОРОВ .....   | 4   |
| ВВЕДЕНИЕ .....   | 6   |
| ГЛАВА I. СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТониАН .....   | 16  |
| § 1.1. О методе расчета нижних уровней энергии .....   | 16  |
| § 1.2. Сверхтонкое взаимодействие .....  | 34  |
| § 1.3. Вычисление параметров спинового гамильтониана .....   | 39  |
| § 1.4. Ионы, основное состояние которых вырождено .....  | 45  |
| § 1.5. Параметр сверхтонкого взаимодействия .....  | 51  |
| § 1.6. Интерпретация спектра ЭПР с помощью спинового<br>гамильтониана .....                        | 61  |
| § 1.7. Запрещенные переходы в тонкой структуре спектров ЭПР .....                                  | 69  |
| § 1.8. Зеемановская энергия и тонкая структура одного порядка<br>величины .....                    | 71  |
| § 1.9. Начальные расщепления больше зеемановской энергии .....                                     | 72  |
| ГЛАВА II. СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРА ЭПР .....  | 77  |
| § 2.1. Расчет сверхтонкой структуры спектра ЭПР (сильное<br>магнитное поле) .....                  | 77  |
| § 2.2. Влияние на спектр ЭПР квадрупольного взаимодействия и<br>зеемановской энергии ядра .....    | 83  |
| § 2.3. Сверхтонкая структура спектра ЭПР в промежуточном<br>магнитном поле .....                   | 90  |
| ГЛАВА III. ОТДЕЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ СПЕКТРОСКОПИИ ЭПР .....   | 95  |
| § 3.1. О магнитно-неэквивалентных ионах с $S=1/2$ в кристаллах<br>кубической симметрии .....       | 95  |
| § 3.2. Свойства спектров ЭПР ионов, находящихся в<br>низкосимметричных кристаллических полях ..... | 100 |
| § 3.3. Эффективный спин и спиновый гамильтониан .....  | 116 |

|   |     |
|---|-----|
| § 3.4.Обобщенный спиновый гамильтониан .....  | 125 |
| ГЛАВА IV. ЛИГАНДНАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРА ЭПР .....   | 140 |
| § 4.1.Взаимодействие парамагнитных ионов с магнитными<br>моментами ядер лигандов .....          | 140 |
| § 4.2.Сателлитная структура спектра ЭПР .....   | 147 |
| ГЛАВА V. НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА ЭПР.<br>ИЗУЧЕНИЕ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДОМ ЭПР ..... | 150 |
| § 5.1.Пара ионов, связанных обменным взаимодействием .....                                      | 150 |
| § 5.2.Пара ионов, связанных обменным взаимодействием<br>с учетом антисимметричного обмена ..... | 156 |
| § 5.3.Спектр ЭПР пар ионов с $S > 1/2$ .....  | 160 |
| § 5.4.Спектр ЭПР обменно-связанных пар при наличии<br>сверхтонкого взаимодействия .....         | 168 |
| § 5.5.Спектр ЭПР цепочки из трех ионов .....  | 176 |
| § 5.6.Сверхтонкая структура спектра ЭПР «троек» .....   | 180 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ 1 .....  | 183 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ 2 .....  | 201 |
| ЛИТЕРАТУРА .....  | 205 |
| ОГЛАВЛЕНИЕ .....  | 207 |