

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗ42Г2

М-348

13/III-78

P14 - 1111

1191/2-78

В.Матц

О ПРОГРАММАХ ПОИСКА ПАРАМЕТРОВ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ
ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЙ
НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ
ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

1977

P14 - 11111

В.Матц

О ПРОГРАММАХ ПОИСКА ПАРАМЕТРОВ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ
ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЙ
НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ
ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

Общественный институт
ядерной физики
БИБЛИОТЕКА

Матц В.

P14 - 11111

О программах поиска параметров кристаллического поля для интерпретаций неупругого рассеяния тепловых нейтронов

Описывается методика поиска параметров кристаллического поля для случаев кубической и гексагональной симметрий на основе энергий переходов между кристаллическими уровнями, наблюдаемых в эксперименте по неупругому рассеянию тепловых нейтронов на образцах, содержащих редкоземельные ионы. Разработаны соответствующие программы поиска на ЭВМ для частного случая иона Pr^{3+} .

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Matz W.

P14 - 11111

On Programs for Finding Crystal Field Parameters to Interpret Inelastic Neutron Scattering

A method for finding crystal field parameters is described using only the energy values observed in an inelastic neutron scattering experiment on compounds containing rare-earth ions. The considerations are done for crystal fields of cubic or hexagonal symmetry. On the basis of this method computer programs for the special case of the Pr^{3+} ion were composed.

The investigation has been performed at the Neutron Physics Laboratory, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. ВВЕДЕНИЕ

Для объяснения целого ряда свойств редкоземельных металлов и их соединений необходимо учитывать действие кристаллического электрического поля внутри твердого тела на редкоземельные ионы^{1,2/}. В частности, это кристаллическое электрическое поле /КЭП/ влияет на незаполненные оболочки $4f$ -электронов редкоземельных элементов /РЗЭ/. В зависимости от силы и симметрии КЭП вырожденные в свободном ионе J -мультиплеты / J -полный момент количества движения/ расщепляются в так называемые кристаллические уровни. Изучая расщепление J -мультиплетов $4f$ -электронов, можно определить величину и симметрию КЭП. В металлических соединениях РЗЭ наблюдаются расщепления мультиплетов порядка $50 \text{ мэВ} / \sim 500 \text{ К} /$, при этом наблюдаемое расстояние между наименьшими мультиплетами - порядка 200 мэВ . Поэтому при исследованиях в области комнатной и более низких температур необходимо учитывать эффекты влияния КЭП только в основном мультиплете $4f$ -электронов.

В последние годы одним из наиболее выгодных среди известных методов изучения КЭП в металлических соединениях РЗЭ представляется неупругое рассеяние тепловых нейтронов. Неупругое рассеяние тепловых нейтронов на $4f$ -электронах РЗЭ связано с переходом электрона с одного кристаллического уровня на другой. Расстояние между этими уровнями обнаруживается в спектре неупругорассеянных нейтронов в виде пиков с определенной энергией.

В настоящей работе описываются программы поиска параметров КЭП на основе энергий переходов между кристаллическими уровнями, измеренных в эксперименте по изучению неупругого рассеяния нейтронов на соединениях РЗЭ. Программы разработаны для частного случая иона Pr^{3+} , который имеет основное состояние $^3\text{H}_4$ ($J=4$).

2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ТЕОРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В рамках метода эквивалентных операторов для гамильтониана КЭП (\mathcal{H}_K) имеет место следующее выражение /3,4/:

$$\mathcal{H}_K = \sum_{\ell=0}^6 \sum_{m=-\ell}^{+\ell} B_{\ell}^m O_{\ell}^m (\hat{J}^2, J_z, J_+, J_-), \quad /1/$$

где O_{ℓ}^m - эквивалентные операторы Стивенса и B_{ℓ}^m - набор параметров КЭП.

В случае КЭП кубической и гексагональной симметрий из /1/ получаются выражения:

$$\mathcal{H}_{K, \text{куб.}} = B_4^{\circ} [O_4^{\circ} + 5 \cdot O_4^4] + B_6^{\circ} [O_6^{\circ} - 21 \cdot O_6^4], \quad /2a/$$

$$\mathcal{H}_{K, \text{гекс.}} = B_2^{\circ} O_2^{\circ} + B_4^{\circ} O_4^{\circ} + B_6^{\circ} O_6^{\circ} + B_6^6 O_6^6. \quad /2b/$$

Для более наглядного обсуждения действия гамильтонианов на мультиплеты $4f$ -электронов выражения /2a,б/ можно видоизменить согласно предложениям Ли, Лиска, Вольфа /5/ и Уоллеса, Сегала /6/:

$$\mathcal{H}_{K, \text{куб.}} = W \left\{ x \cdot \frac{O_4}{F_4} + (1 - |x|) \frac{O_6}{F_6} \right\}, \quad /3a/$$

$$\mathcal{H}_{K, \text{гекс.}} = W \left\{ (1 - |y|) \frac{O_2^{\circ}}{F_2} + y \left[x \cdot \frac{O_4^{\circ}}{F_4} + (1 - |x|) \frac{O_6^{\circ} + V \cdot O_6^6}{F_6} \right] \right\}, \quad /3b/$$

где O_4, O_6 - сокращения для выражений в скобках /2a/ и F_2, F_4, F_6 - числа, которые примут значения 1, 60, 1260 соответственно для $J=4$ (Pr^{3+}). Параметры КЭП B_{ℓ}^m содержатся здесь в одном параметре W , который дает полное расщепление мультиплета, и в двух параметрах x и y , которые описывают силы члена 4-го порядка КЭП по отношению к вкладу членов 6-го и 2-го порядков, соответственно:

$$x = \frac{A}{1 + |A|}, \quad A = \frac{B_4^{\circ} \cdot F_4}{B_6^{\circ} \cdot F_6}, \quad /4a/$$

$$y = \frac{C}{1 + |C|}, \quad C = \frac{B_4^{\circ} \cdot F_4}{B_2^{\circ} \cdot F_2} \cdot \frac{1}{x}. \quad /4b/$$

Удобство преобразования гамильтонианов /2a,б/ в /3a,б/ состоит в том, что оказывается возможным описать все комбинации параметров B_{ℓ}^m , т.к. x и y меняются только в ограниченном интервале $[-1, +1]$. В /3б/ дополнительно вводится параметр $V = B_6^6 / B_6^{\circ}$, определяемый из модели точечных зарядов для КЭП /3/.

Расщепление основного мультиплета Pr^{3+} в кубическом и гексагональном КЭП иллюстрируют рис. 1 и 2. В кубическом КЭП получается 4 кристаллических уровня /один синглет Γ_1 , один дублет Γ_3 , два триплета Γ_4 и Γ_5 /, а в гексагональном КЭП - 6 кристаллических уровней /три синглета $\Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4$ и три дублета $\Gamma_{5A}, \Gamma_{5B}, \Gamma_6$ /.

Дифференциальное сечение рассеяния тепловых нейтронов на переходах между кристаллическими уровнями для системы парамагнитных ионов описывается в дипольном приближении /малая передача импульса κ / следующим образом /7/:

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\epsilon} = N \left(\frac{1.91 e^2}{2 m_e c^2} g \right)^2 \frac{\kappa'}{\kappa} f^2(\kappa) \sum_{n,n'} p_n |\langle \Gamma_{n'} | J_{\perp} | \Gamma_n \rangle|^2 \times \delta(E_{n'} - E_n - \epsilon), \quad /5/$$

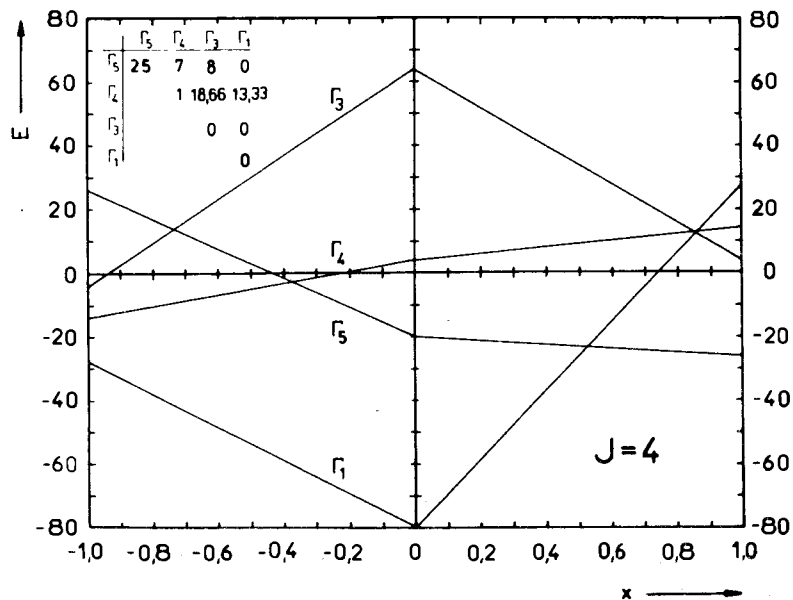


Рис. 1. Расщепление 3H_4 -мультиплета Pr^{3+} в кубическом КЭП в зависимости от параметра КЭП x . В углу приведены вероятности дипольных переходов между кристаллическими уровнями.

где N - число ионов, \vec{k}' , \vec{k} - волновые векторы рассеянных и падающих нейтронов соответственно, $f(\kappa)$ - магнитный формфактор, p_n - заселенность уровня E_n , $|\Gamma_n\rangle$ и $|\Gamma_n'\rangle$ - волновые функции уровней E_n и E_n' , J_{\perp} - компонента оператора полного момента количества движения, перпендикулярная $\vec{\kappa}$, ϵ - энергия, переданная в процессе неупругого рассеяния.

Квадрат матричного элемента $|\langle \Gamma_n' | J_{\perp} | \Gamma_n \rangle|^2$ описывает вероятность дипольных переходов между кристаллическими уровнями E_n и E_n' , т.е. относительную интенсивность перехода с энергией $\epsilon = E_n' - E_n$. От типа симметрии КЭП зависит, между какими уровнями Γ_n принципиально возможны дипольные переходы и, соответственно, какова их интенсивность. Вероятности переходов /без нормировки/ для Pr^{3+} в кубическом КЭП указаны на рис. 1. Для случая гексагонального КЭП

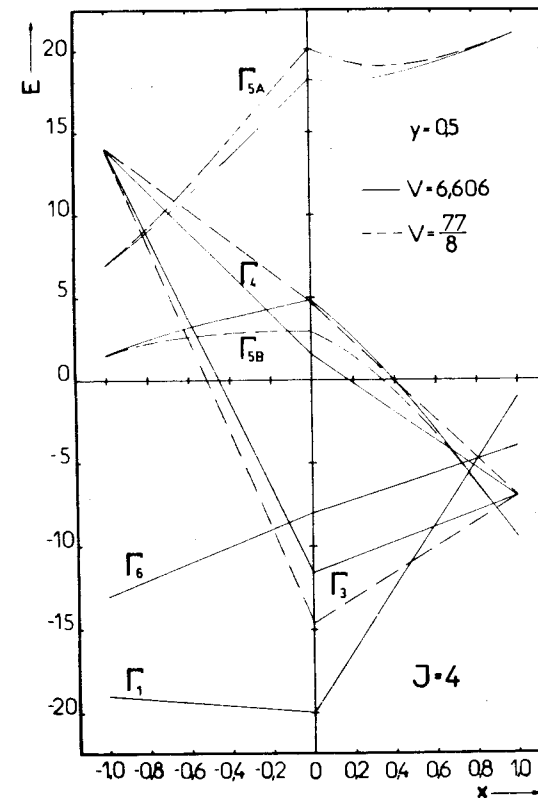


Рис. 2. Расщепление 3H_4 -мультиплета Pr^{3+} в гексагональном КЭП в зависимости от параметра КЭП x и для постоянного параметра КЭП $y = 0,5$. Показана также зависимость расщепления от величины V .

они приведены в таблице. Из рис. 1 видно, что для Pr^{3+} в кубическом КЭП существует 4 дипольных перехода, вероятность которых является постоянной. Для случая КЭП гексагональной симметрии существует 9 дипольных переходов, из которых только 2 имеют постоянную вероятность переходов /см. табл./. У остальных

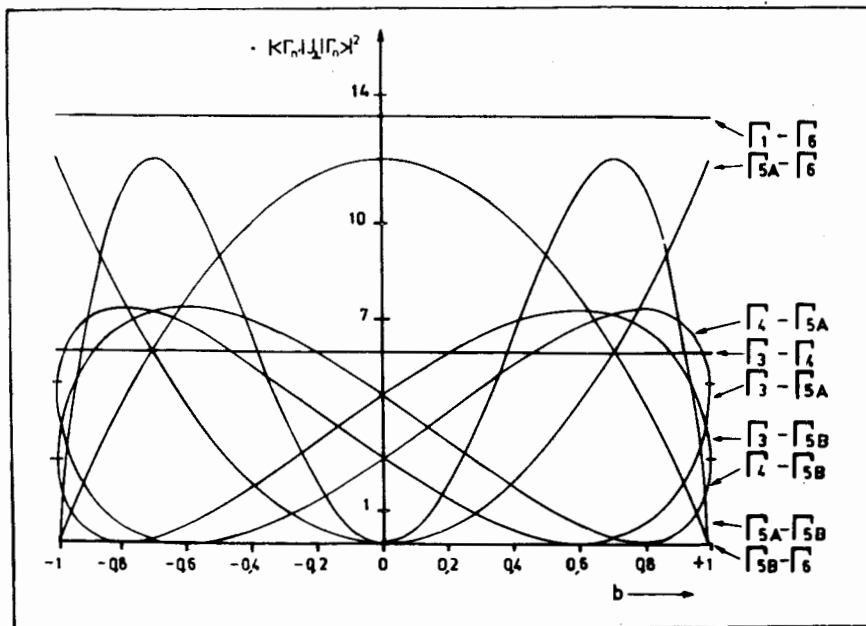
$|\langle \Gamma_n' | J_{\perp} | \Gamma_n \rangle|^2$ зависит через коэффициенты волновых функций b и c от параметров x и y . Эта зависимость показана на рис. 3.

Таблица

Волновые функции кристаллических уровней и вероятности переходов между ними для случая Pt^{3+} в гексагональном КЭП

$$\begin{aligned} \Gamma_4: 10 > & \quad \Gamma_4: -a1-3 > +a13 > & \quad \Gamma_{5B}: b1 \pm 4 > +c1 \pm 2 > \\ \Gamma_3: a1-3 > +a13 > & \quad \Gamma_{5A}: c1 \pm 4 > -b1 \pm 2 > & \quad \Gamma_6: 1 \pm 1 > \end{aligned}$$

	Γ_4	Γ_3	Γ_4	Γ_{5A}	Γ_{5B}	Γ_6
Γ_4	0	0	0	0	0	$\frac{40}{3}$
Γ_3		0	$24a^4$	$\frac{4}{3}a^2(2c-\sqrt{7}b)^2$	$\frac{4}{3}a^2(2b+\sqrt{7}c)^2$	0
Γ_4			0	$\frac{4}{3}a^2(2c+\sqrt{7}b)^2$	$\frac{4}{3}a^2(2b-\sqrt{7}c)^2$	0
Γ_{5A}				$\frac{16}{3}(b^2-2c)^2$	$48b^2c^2$	$12b^2$
Γ_{5B}					$\frac{16}{3}(2b^2-c^2)^2$	$12c^2$
Γ_6						$\frac{4}{3}$



3. ПРИНЦИП ПОИСКА ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов на образцах, содержащих ионы РЗЭ, наблюдается ряд пиков, обусловленных переходами между кристаллическими уровнями. Параметры КЭП обычно находят путем подгонки экспериментальных спектров, варьируя x и y в полном интервале $[-1, +1]$ и W в разумном диапазоне $^{8/}$. Дополнительным параметром подгонки является, кроме того, ширина линии переходов.

В случае сложной формы неупругого пика, как это имеет место на спектрометре обратной геометрии с бериллиевым фильтром $^{9/}$, подобный подход не пригоден. Кроме того, в спектре неупругорассеянных нейтронов есть не только вклады от рассеяния на переходах между кристаллическими уровнями, а также вклады от рассеяния на фонах. Единственное, что можно сразу определить из спектров, это положение пиков. Поэтому нами была разработана методика поиска параметров КЭП на основе наблюдаемых энергий переходов.

Из экспериментальных спектров можно определить значения энергий для нескольких кристаллических переходов $\epsilon_i^{ЭКСП.}$ и их ошибок $\Delta \epsilon_i^{ЭКСП.}$. Ожидаемое количество $\epsilon_i^{ЭКСП.}$ обычно меньше теоретически допустимого количества переходов $\epsilon_n^{ТЕОР.}$ / $n=1, \dots, 4$ в кубическом КЭП для Pt^{3+} ; $n=1, \dots, 9$ - в гексагональном КЭП/. Значения $\epsilon_n^{ТЕОР.}$ являются функциями параметров КЭП, причем W - тоже масштабный фактор, как и в $^{3/}$:

$$\epsilon_n^{ТЕОР.} = \epsilon_n^{ТЕОР.}(x, y, W) = W \cdot \epsilon_n^{*ТЕОР.}(x, y). \quad /6/$$

Хотя в случае кубического КЭП имеются только x и W , для описания принципа поиска параметров КЭП исполь-

Рис. 3. Зависимость вероятности переходов между кристаллическими уровнями для Pt^{3+} в гексагональном КЭП от коэффициента волновой функции b . Другой коэффициент c определяется на основе требования нормировки волновой функции $c = \sqrt{1-b^2}$.

зается более общий набор x, y, W . Для одного набора x, y вычисляются все $\epsilon_n^{* \text{теор}}$ и все отношения энергий переходов:

$$V_{nm}^{\text{теор}} = \frac{\epsilon_n^{* \text{теор}}}{\epsilon_m^{* \text{теор}}} \quad /7/$$

Из экспериментальных энергий переходов и их ошибок тоже можно определить соотношения $V_{ij}^{\text{ЭКСП}}$ и для каждого $V_{ij}^{\text{ЭКСП}}$ - верхнюю и нижнюю границы:

$$V_{ij}^{\text{ЭКСП}} = \frac{\epsilon_i^{\text{ЭКСП}}}{\epsilon_j^{\text{ЭКСП}}} \quad /8/$$

$$\text{OG}_{ij} = \frac{\epsilon_i^{\text{ЭКСП}} + \Delta \epsilon_i^{\text{ЭКСП}}}{\epsilon_j^{\text{ЭКСП}} - \Delta \epsilon_j^{\text{ЭКСП}}}, \quad \text{UG}_{ij} = \frac{\epsilon_i^{\text{ЭКСП}} - \Delta \epsilon_i^{\text{ЭКСП}}}{\epsilon_j^{\text{ЭКСП}} + \Delta \epsilon_j^{\text{ЭКСП}}} \quad /8a/$$

Если выполняется требование

$$\text{UG}_{ij} \leq V_{nm}^{\text{теор}} \leq \text{OG}_{ij} \quad /9/$$

из непосредственного сравнения $V_{ij}^{\text{ЭКСП}} = V_{nm}^{\text{теор}}$ можно найти пока еще не известный параметр W :

$$V_{ij}^{\text{ЭКСП}} = V_{nm}^{\text{теор}} \longrightarrow \begin{cases} \epsilon_i^{\text{ЭКСП}} = W_1 \cdot \epsilon_n^{* \text{теор}} \\ \epsilon_j^{\text{ЭКСП}} = W_2 \cdot \epsilon_m^{* \text{теор}} \end{cases} \quad /10/$$

Таким образом, для одного набора x, y получается ряд значений масштабного параметра W . Поскольку оценки границ для соотношения экспериментальных энергий переходов в /8a/ довольно грубые, а следовательно, сравнение $V_{ij}^{\text{ЭКСП}} = V_{nm}^{\text{теор}}$ не совсем корректное,

необходимо выбрать те значения W , которые дают все экспериментальные энергии переходов. С этой целью все полученные W используются для вычисления полного набора теоретически возможных переходов, а затем среди них проверяется наличие всех экспериментальных переходов в границах ошибок. При этом определяются относительные ошибки F_i :

$$F_i = \frac{\Delta \epsilon_i^{\text{ЭКСП}}}{\epsilon_i^{\text{ЭКСП}}} \quad /11/$$

Если для одного значения F_i одно из значений теоретической энергии удовлетворяет условию

$$\left| \frac{\epsilon_i^{\text{ЭКСП}}}{\epsilon_n^{\text{теор}}} - 1 \right| \leq F_i \quad /12/$$

то $\epsilon_n^{\text{теор}}$ и $\epsilon_i^{\text{ЭКСП}}$ совпадают в границах точности эксперимента. Только если для каждого F_i найдется соответствующее $\epsilon_n^{\text{теор}}$, которое отвечает вышеозначенному условию /12/, набор параметров КЭП x, y, W , в принципе, может объяснить экспериментальный спектр.

При нахождении наборов x, y, W до сих пор использовались только энергии кристаллических переходов. Для окончательного выбора наилучших параметров КЭП следует использовать интенсивность переходов, т.е. матричные элементы $|\langle \Gamma_n \cdot | J_{\perp} | \Gamma_n \rangle|^2$, входящие в сечение рассеяния нейтронов /5/.

4. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММ ДЛЯ ЭВМ

Чтобы провести поиск наборов параметров КЭП из энергий переходов, определенных в эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов, были разработаны программы для ЭВМ SUCHEX и SUCKUB /случай ионов Pr^{3+} в гексагональном и кубическом КЭП соответственно/. Кроме определения наборов параметров КЭП по методу, описанному в предыдущем параграфе, программы вычисляют также вероятности переходов между кристаллическими уровнями, модифицированные с фактором заселенности уровня, из которого исходит переход.

Сначала в основных чертах описывается более общая программа SUCHEX для случая гексагонального КЭП, а затем указывается на отличия программы SUCKUB для кубического КЭП.

В качестве вводных данных требуются следующие величины:

- SUB - информация о веществе, например химическая формула вещества. Это используется только для печати результатов.
- NEX - число переходов, найденных в эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов.
- TE - энергии наблюдаемых переходов в мэВ.
- FE - экспериментальные ошибки значений энергий переходов /тоже в мэВ/.
- T - три значения температуры /в Кельвинах/, для которых программа вычисляет модифицированные с фактором заселенности вероятности переходов.
- IGRUND - число для определения основного кристаллического уровня. Если он неизвестен, дается IGRUND = 0.
- XO, YO - начальные значения параметров КЭП x и y , соответственно.
- XE, YE - конечные значения параметров x и y , соответственно.
- DX, DY - длина шага для вариации параметров x и y .
- IW - процентное число, в границе которого проводится усреднение параметров КЭП W .

Сначала определяются соотношения экспериментальных переходов $V_{ij}^{\text{ЭКСП}}$ и их ошибок OG_{ij} , UG_{ij} в соответствии с /8/ и /8а/. Одновременно вычисляются обратные значения $1/V_{ij}^{\text{ЭКСП}}$ как самостоятельные соотношения, чтобы включить все возможные соотношения в поиск параметров КЭП.

Из XO , XE , DX находится число шагов MX для параметра КЭП x с длиной шага DX . То же самое делается и для параметра y .

После этого начинаются циклы, в которых варьируются параметры x и y . Для каждого набора x , y определяются положения кристаллических уровней, энергии переходов и их соотношения $V_{nm}^{\text{ТЕОР}}$. Положение кри-

сталлических уровней позволяет вычислить только диагонализация гамильтониана /2/ или /3/. Из-за простоты матрицы ее диагонализация проводилась в общем виде, а в подпрограмме вычислялись положения кристаллических уровней в виде аналитических выражений параметров кристаллического поля x и y .

Следующая операция заключается в поиске тех теоретических соотношений двух энергий переходов $V_{nm}^{\text{ТЕОР}}$, которые лежат в границах ошибок UG_{ij} и OG_{ij} экспериментальных соотношений $V_{ij}^{\text{ЭКСП}}$. Если число $V_{nm}^{\text{ТЕОР}}$, отвечающее требованию /9/, равно или больше $(NEX)_2$, то

вычисляются все возможные значения параметра КЭП W согласно /10/. В противном случае берется следующий набор x, y .

Энергии переходов получаются из усредненных значений W . Усреднение проводится через все W , отличающиеся друг от друга не более чем на IW процентов. С помощью специальной подпрограммы и с учетом требования /12/ проверяется наличие всех экспериментально найденных энергий переходов среди теоретически определенных энергий для одного набора параметров x, y, W . При этом каждый экспериментальный переход считается как существующий в теоретической схеме уровней только один раз, даже в случае, когда теоретически имеются два разных перехода с энергиями, лежащими в границах ошибок одного экспериментального перехода. Если определенный набор x, y, W дает все экспериментальные переходы, для него рассчитываются вероятности переходов между кристаллическими уровнями и их модифицированные с фактором заселенности значения для трех температур T . Так как для этого необходимо знание волновых функций, проводится полная диагонализация гамильтониана КЭП. Чтобы модифицировать вероятности переходов с фактором заселенности, надо определить, с какого уровня начинается переход. В настоящей программе это делается для экспериментов с потерей нейтронами энергии (down - scattering), т.е. переход начинается всегда с более низколежащего уровня. При необходимости перейти к эксперименту с выигрышем нейтронами энергии (up - scattering) в программе

надо менять только одно сравнение /“больше чем“ на “меньше чем“/.

Заключительный этап состоит в печатании результатов. Пример печати показан на рис. 4. Выдаются параметры КЭП x, y, W /первая строчка/, энергии уровней и коэффициенты волновых функций b и c /вторая строчка/, энергии переходов /3-я строчка/, вероятности переходов /4-я строчка/ и их модифицированные с фактором заселенности значения /5-7-я строчки/. Модифицированные вероятности переходов нормируются на самое большое значение для второй температуры /6-я строчка/. Если основной кристаллический уровень неизвестен ($IGRUND=0$), результаты выдаются дважды, соответственно для $W>0$ и $W<0$.

X = .33	Y = .47	W = .6876 MEV	IK = .0030	CK = .4678					
KRYSAUFLAGEN	5.23	23.13	0.00	10.90	32.12	9.91	10.90	32.12	21.14
UEBERGANGSWE	4.68	1.07	22.21	23.13	12.14	9.00	10.90	32.12	21.14
KAHRSCHWEL.	13.33	9.374	2.626	6.000	1.312	6.021	7.146	.187	8.205
E = 10. K	.0109	.0001	.0000	2.1111	.0000	.0000	2.5143	.0459	.0000
T = 35. K	.9133	.6778	.1899	.8394	.0820	.0358	1.0000	.0362	.5128
T = 250. K	.7070	.8243	.2309	.3823	.1105	.1560	.4672	.0122	.6913

Рис. 4. Пример печати результатов от программы SUCHEX.

Иногда имеется дополнительная информация о связи одного теоретического перехода /например, $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_6$ / с одной экспериментальной энергией. Отсюда можно сразу получить одно значение W для каждого набора x, y . Этот вариант также предусмотрен в программе SUCHEX.

Случай, когда Pg^{3+} находится в кубическом КЭП, проще, что находит отражение в программе SUCKUB. Основные упрощения заключаются в следующем:

- варьируется только один параметр КЭП x ;
- вероятности переходов не зависят от параметра x , поэтому в программу сразу внесены их постоянные величины, что полностью исключает необходимость диагонализации гамильтониана;
- не учитывается основной кристаллический уровень, а вероятности переходов, модифицированные с фактором заселенности, всегда определяются для $W>0$ и $W<0$.

Обе программы используются на ЭВМ БЭСМ-6 и CDC-6500 ОИЯИ. Средние затраты счетного времени CDC-6500 для программы SUCKUB на 200 значений параметра x составляют 5-10 с, а для программы SUCHEX на 200 наборов x, y - примерно 20-25 с.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Основываясь на результатах измерений энергий переходов между кристаллическими уровнями, с помощью программы поиска мы определили те наборы параметров КЭП, для которых в теоретической схеме уровней существуют наблюдаемые переходы. Как правило, получается несколько таких наборов. Окончательный выбор набора, наилучшего для интерпретации экспериментального спектра, должен осуществляться с учетом интенсивностей пиков, т.е. вероятностей переходов, модифицированных с фактором заселенности. Практически, в общем случае, это заключается в процедуре подгонки теоретических переходов к экспериментальным спектрам. Ограниченное количество наборов параметров КЭП, имеющееся в нашем распоряжении, позволяет существенно экономить время на ЭВМ. Эффективность поиска параметров КЭП иллюстрируется следующим примером. В эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов для Pg^{3+} в гексагональном КЭП было найдено 5 энергий переходов. С помощью программы из 10 000 возможных наборов x, y определили 46 наборов, содержащих экспериментально полученные значения энергий переходов.

Обычно в случае гексагонального КЭП отмечается редукция возможных наборов x, y на фактор 180-230. При подгонке экспериментальных спектров путем простой вариации всех параметров КЭП требуемое время увеличивается из-за дополнительной вариации параметра W . В случае кубического КЭП фактор уменьшения количества возможных параметров не превышает 5-10.

Ограничение программ SUCHEX и SUCKUB состоит в том, что требуется довольно точное определение энергий переходов из экспериментальных спектров. Если

в спектре неупругого рассеяния нейтронов разрешенные пики не обнаруживаются, применение этих программ дает только грубую оценку диапазона параметров x , y , w . Другое принципиальное ограничение заключается в использовании феноменологической теории КЭП без учета других эффектов, таких как обменное взаимодействие, примесь возбужденных мультиплетов к основному и т.д.

Хотя программы написаны для частного случая редкоземельного иона Pr^{3+} ($J=4$), предлагаемый принцип можно легко распространить на другие редкоземельные ионы, где меняется только число уровней и переходов.

Автор выражает свою благодарность проф. А. Андреефу за постоянную поддержку при выполнении этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Purwins H.-G. *Ann. Phys.*, 1972, 7, p.329.
2. Wallace W.E. *Rare Earth Intermetallics*, Academic Press, New York-London, 1973.
3. Hutchings M.T. In: *Solid State Physics*, vol. 16, p.227. Academic Press, New York - London, 1964.
4. Липпольд Б., Мамц В. ОИЯИ, P14-10434, Дубна, 1977.
5. Lea K.R., Leask M.J.M., Wolf W.P. *J. Phys. Chem. Solids*, 1962, 23, p.1381.
6. Segal E., Wallace W.E. *J. Solid State Chem.*, 1970, 2, p.347.
7. De Gennes P. In: *Magnetism* (ed. Rado/Suhl), vol. III, p.115. Academic Press, New York - London, 1963.
8. Furrer A. e.a. *Int. J. Magnetism*, 1973, 4, p.63.
Алексеев П.А. и др. ФТТ, 1976, 18, с.676.
9. Айххорн Ф. и др. ОИЯИ, 13-8727, Дубна, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 ноября 1977 года.