

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 2	AÑO 1971

01.71.07

CAB/1971/6

EFFECTOS DE TENSIONES INTERNAS CRISTALINAS EN ESPECTROS DE  
RESONANCIA PARAMAGNETICA ELECTRONICA. CASO DE Ni<sup>2+</sup> EN OCa

R. CALVO\*, M.C.G. PASSEGGI, C. FAINSTEIN

\* Miembro de la Carrera del Investigador Científico, CNICT.

Abril 1971  
Bariloche - Argentina

RESUMEN.-

Los anchos y la forma de líneas de R.P.E. de  $\text{Ni}^{2+}$  como impureza en posiciones cúbicas en un cristal de OCa han sido medidas a  $1,35^\circ\text{K}$  en el plano (110) con el objeto de tener información sobre la distribución de tensiones internas del cristal. La variación angular del ancho de línea observada en ese plano puede explicarse por:

$$\begin{aligned}(\Delta H_{1/2})^2 &= a\Lambda^2 + b(1 - \Lambda^2) \\ \Lambda^2 &= 1 - 3 \text{sen}^2 \theta + \frac{15}{4} \text{sen}^4 \theta \\ a &= 10,4 \times 10^4 \text{ (gauss)}^2 \\ b &= 9,2 \times 10^4 \text{ (gauss)}^2\end{aligned}$$

donde  $\theta$  es el ángulo en el plano (110) entre el campo magnético  $H$  y la dirección  $[001]$ .

Usando un modelo estadístico para la distribución de tensiones internas del cristal y los valores de los coeficientes de spin red para  $\text{Ni}^{2+}$  OCa se obtuvo para los anchos cuadráticos medios de las distribuciones de tensiones internas:

$$\begin{aligned}(\langle X^2 \rangle_{[001]})^{1/2} &= (235 \pm 20) \text{ Kgr/cm}^2 \\ (\langle X^2 \rangle_{[111]})^{1/2} &= (183 \pm 20) \text{ Kgr/cm}^2\end{aligned}$$

La forma de línea espectral observada es Lorentziana. Se discute la manera en que la forma de línea puede asociarse al tipo de defectos presentes, y se concluye que en este caso se trata de defectos puntuales.

## 1 - Introducción.-

La resonancia paramagnética electrónica (RPE) [ 1, 2 ] estudia la absorción resonante de energía en transiciones entre niveles Zeeman del estado fundamental de centros paramagnéticos (átomos, iones, defectos, etc.). La muestra a estudiar se somete a un campo magnético que rompe la degeneración de los niveles y se analiza la absorción de radiación electromagnética en el rango de microondas ( $\lambda = 1$  a  $3$  cm).

Los espectros permiten obtener información sobre las propiedades estáticas y dinámicas del arreglo molecular o cristalino en la vecindad del centro paramagnético [ 3, 4 ] .

En este trabajo estudiamos las formas y los anchos de las líneas de RPE de un ión paramagnético ( $\text{Ni}^{2+}$ ) introducido como impureza substitucional en monocristales de óxido de calcio. El objeto es obtener datos sobre el estado de tensiones internas a que está sometido el cristal y las causas que motivan estas tensiones.

Las líneas de RPE pueden estar ensanchadas homogénea o inhomogéneamente. Ensanchamiento homogéneo es el causado por la vida media finita de los estados entre los cuales ocurre la transición. Un ensanchamiento inhomogéneo se produce en general cuando los sitios ocupados por los distintos centros paramagnéticos presentes en el cristal no son exactamente equivalentes. Las diferencias derivan de que en distintas posiciones existen campos magnéticos o eléctricos ligeramente distintos. La línea observada en estos casos es la envolvente de la distribución de las líneas individuales correspondientes a cada centro paramagnético.

Distribuciones de campos magnéticos aparecen en cristales diamagnéticos cuando la densidad de centros paramagnéticos introducidos es tal que hay interacción entre sus momentos magnéticos. Este efecto puede en general

hacerse despreciable trabajando con muestra "magnéticamente diluídas" donde en promedio la distancia entre dos centros paramagnéticos es tal que su interacción es despreciable.

Distribuciones de campos eléctricos aparecen sin embargo casi normalmente debido a que los cristales no son perfectos. Hay una distribución de tensiones internas que modifican localmente la simetría cristalina respecto de la situación de equilibrio. En estos casos la medición del ancho de línea en función de la orientación relativa entre el campo magnético aplicado y los ejes cristalinos proporciona una medida cuantitativa del campo de tensiones internas del cristal.

La forma de la línea de RPE permite en estos casos tener una idea cualitativa del tipo de defectos responsable de las tensiones y en algunos casos conocer cuantitativamente el número de los defectos presentes.

## 2 - TEORIA.-

A.  $\tilde{\text{Ni}}^{2+}$  en posiciones cúbicas de OCa

El ión  $\text{Ni}^{2+}$  tiene una configuración electrónica  $3d^8$  y su estado fundamental en la simetría cúbica de OCa es un triplete de spin  $^3 A_{2g}$  (en el grupo puntual  $O_h$ ). Su espectro de RPE puede describirse por un Hamiltoniano de spin

$$H_c = g \beta \tilde{H} \cdot \tilde{S} \quad (2.1)$$

donde:

$g \equiv$  factor giromagnético = 2,32

$\beta \equiv$  magneton de Bohr

$\tilde{H} \equiv$  campo magnético

$\tilde{S} \equiv$  operador de Spin, el cual en este caso opera sobre los autoestados correspondientes a un spin uno del triplete fundamental.

El campo magnético desdobra estos niveles y el espectro presenta una única línea espectral a la frecuencia:

$$h \nu = g \beta H$$

B - Efecto de apartamientos de la simetría cúbica de la línea de REP.

Apartamientos de la simetría cúbica origina el desdoblamiento en dos líneas a frecuencias  $\nu_1$  y  $\nu_2$ . Este efecto puede explicarse agregando a (2.1) un término de simetría no cúbica  $H_{nc}$ , que puede expresarse como [6]

$$H_{nc} = \sum_{i,j} S_i D_{ij} S_j \quad (2.2)$$

El término  $H_{nc}$ , por ejemplo, para una distorsión tetragonal

$$H_{nc} (\text{tetrag.}) = D \left[ 3 S_z^2 - S(S+1) \right]$$

da como resultado:

$$h\nu_1 = g \beta H + 3 D$$

$$h\nu_2 = g \beta H - 3 D$$

Cuando el cristal presenta una distribución de tensiones internas la magnitud del parámetro  $D_{ij}$  no es constante para todos los iones impurezas de la red sino que existe una distribución de tales valores, relacionada con el estado de deformación de los distintos sitios. Esta distribución de deformaciones produce entonces una distribución continua de las frecuencias de resonancia, lo que explica el ensanchamiento de la línea espectral.

Es conveniente expresar el tensor  $D_{ij}$  en términos del tensor de tensiones. Esta relación puede expresarse:

$$D_{ij} = \sum_{k,\ell} C_{ij\ell} X_{\ell} \quad (2.3)$$

donde  $C_{ijkl}$  es un tensor que representa el acoplamiento entre el spin y el cristal. Este tensor es invariante ante las operaciones del grupo cúbico y puede demostrarse que sólo dos componentes son distintas [5].  $X_{ij}$  es el tensor de tensiones en cada punto del cristal.

El corrimiento en frecuencia respecto del centro de la línea de REP para el caso de simetría cúbica resulta:

$$\delta \nu_{m_S \rightarrow m_S - 1} = g \cdot \beta \cdot \delta H_{m_S \rightarrow m_S - 1}$$

con [5]

$$\delta H_{m_S \rightarrow m_S - 1} = -\frac{3}{2} C_{11} \sum_i X_{ii} \Lambda_{ii} + 3 C_{44} \sum_{i>j} X_{ij} \Lambda_{ij} \quad (2.4)$$

donde  $C_{11} \equiv C_{11111}$  y  $C_{44} \equiv C_{2323}$  en la notación de Voight, y

$$\begin{aligned} \Lambda_{11} &= \frac{3}{2} \cos^2 \psi \sin^2 \theta - \frac{1}{2} \\ \Lambda_{22} &= \frac{3}{2} \sin^2 \psi \sin^2 \theta - \frac{1}{2} \\ \Lambda_{33} &= \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\Lambda_{12} = \cos \psi \sin \psi \sin^2 \theta$$

$$\Lambda_{23} = \cos \theta \sin \theta \sin \psi$$

$$\Lambda_{31} = \cos \theta \sin \theta \cos \psi$$

Los ángulos  $\theta$  y  $\psi$  de orientación del campo magnético respecto de los ejes cristalográficos se encuentran definidos en la Fig. 1.

Para calcular los anchos de línea consideraremos la densidad de probabilidad de la existencia de un campo de tensiones de magnitud comprendida entre  $X_{ij}$  y  $X_{ij} + \delta X_{ij}$ ; llamando  $P(X)$  a esta densidad de probabilidad será

$$P(X) = \prod_{i>j} P(X_{ij})$$

en la suposición que las distintas componentes de  $X_{ij}$  no están correlacionadas entre si [7].

Debe cumplirse además

$$\int_{X_{ij}} P(X_{ij}) dX_{ij} = 1$$

de forma que resulta:

$$\langle \delta H^2 \rangle = \int_{X_{ij}} \delta H^2 \prod_{i>j} P(X_{ij}) dX_{ij} \quad (2.6)$$

Suponiendo que la línea espectral es simétrica, condición que se cumple en nuestro caso, será:

$$P(X_{ij}) = P(-X_{ij}) \quad (2.7)$$

con lo cual

$$\langle \delta H^2 \rangle = \frac{9}{4} C_{11}^2 \sum_j \langle X_{ii}^2 \rangle \Lambda_{ii}^2 + 9 C_{44}^2 \sum_{i<j} \langle X_{ij}^2 \rangle \Lambda_{ij}^2 \quad (2.8)$$

con

$$\langle X_{ij}^2 \rangle = \int_{X_{ij}} X_{ij}^2 P(X_{ij}) dX_{ij} \quad (2.9)$$

Para comparar estos cálculos con las observaciones realizadas se determinó una relación que vincula el ancho de la línea a altura mitad  $\Delta H_{1/2}$  con el valor  $\langle \delta H^2 \rangle$  de la forma:

$$(\Delta H_{1/2})^2 = K \langle \delta H^2 \rangle \quad (2.10)$$

En el Apéndice se determina el valor de  $K$  para una línea espectral Lorentziana cortada [8], obteniéndose para ese caso

$$K \cong \frac{8}{7}$$

A partir de las ecuaciones (2.8) y (2.10) puede observarse que la medición de la variación angular del ancho de línea y el conocimiento de los coeficientes  $C_{11}$  y  $C_{44}$  permite obtener los valores cuadráticos medios del campo de tensiones internas "vistas" por las impurezas en el cristal.

Experimentalmente se encontró que  $\Delta H_{1/2}$  en las direcciones  $\begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 1 \end{bmatrix}$  y  $\begin{bmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \end{bmatrix}$  toma el mismo valor dentro del error experimental.

Suponiendo que para la dirección  $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$  ocurra lo mismo, ello implica

$$\langle X_{12}^2 \rangle \equiv \langle X_{13}^2 \rangle \equiv \langle X_{23}^2 \rangle$$

puede suponerse que lo mismo ocurre para las direcciones tetragonales, de manera que:

$$\langle X_{11}^2 \rangle = \langle X_{22}^2 \rangle = \langle X_{33}^2 \rangle$$

Resulta así:

$$\left( \Delta H_{1/2} \right)^2 = \frac{8}{7} \left[ \frac{27}{8} C_{11}^2 \Lambda^2 \langle X_{11}^2 \rangle + 3 C_{44}^2 (1 - \Lambda^2) \langle X_{12}^2 \rangle \right]$$

donde

$$\Lambda^2 = \Lambda_{11}^2 + \Lambda_{22}^2 + \Lambda_{33}^2 \quad (2.12)$$

En nuestros experimentos se eligió como plano de rotación del campo magnético el definido por

$$\psi = -45^\circ \text{ (plano (110) )}$$

Con este valor y la ecuación (2.11) resulta:

$$\begin{aligned} \text{a) } \left( \Delta H_{1/2} \right)^2_{\begin{bmatrix} 00\bar{1} \end{bmatrix}} &= \frac{27}{7} C_{11}^2 \langle X_{11}^2 \rangle \quad ; \quad \theta = 0^\circ \\ \text{b) } \left( \Delta H_{1/2} \right)^2_{\begin{bmatrix} 11\bar{1} \end{bmatrix}} &= \frac{24}{7} C_{44}^2 \langle X_{12}^2 \rangle \quad ; \quad \theta = 54^\circ 45' \\ \text{c) } \left( \Delta H_{1/2} \right)^2_{\begin{bmatrix} 110 \end{bmatrix}} &= \frac{1}{4} \left( \Delta H_{1/2} \right)^2_{\begin{bmatrix} 00\bar{1} \end{bmatrix}} + \frac{3}{4} \left( \Delta H_{1/2} \right)^2_{\begin{bmatrix} 11\bar{1} \end{bmatrix}} \quad ; \quad \theta = 90^\circ \end{aligned} \quad (2.13)$$

C - Formas de Línea.-  
~

Las mediciones de las formas de las líneas permiten obtener, en general, ideas cualitativas de los tipos de defectos que dan origen al ensanchamiento inhomogéneo de las líneas de R.P.E.

Considerando un modelo estadístico es posible asociar distintas formas de línea  $I(\epsilon)$  y su dependencia del ensanchamiento por deformación  $\epsilon$  con un tipo particular de defecto [7].

La forma de línea está dada por:

$$I(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\eta \cos(\eta\epsilon) \psi(\eta) \quad (2.14)$$

donde  $\psi(\eta)$  es una función que depende de la densidad de defectos y su distribución estadística.

La función  $\psi(\eta)$  caracteriza efectivamente el tipo de defecto; algunos casos comunes se resumen a continuación:

a) Dislocaciones:

Cuando existen dislocaciones de borde o de hélice puras, y suponiendo que ellas están distribuidas en forma homogénea e isotrópica, sin estar correlacionadas en posición con la impureza en estudio, se obtiene

$$\psi(\eta) = \exp \left[ -\eta^2 L (A - B \ln |\eta|) \right] \quad (2.15)$$

donde  $A$  y  $B$  son parámetros relacionados con la forma del campo de dislocaciones y  $L$  representa la densidad de dislocaciones. Si  $B = 0$  esto corresponde a una línea Gaussiana con un ancho proporcional a  $L^{1/2}$ .

Si  $B \neq 0$  la línea espectral cae por debajo de una curva Gaussiana para valores grandes de  $\epsilon$ .

b) Defectos puntuales.-

Este tipo de defectos puede tener diversos orígenes que en general se estudian bajo dos casos extremos: el caso en que los defectos tienen distinto tamaño que el ión al cual reemplazan, lo que origina un campo de tensiones, o el caso en que tienen distinta carga que el ión reemplazado, lo que origina un ensanchamiento por la presencia de un gradiente de campo eléctrico. Para ambos casos el campo de tensiones es esencialmente el mismo, de modo que suponiendo una distribución al azar de estos defectos resulta:

$$\psi (\eta) = \exp (- A |\eta|) \quad (2.16)$$

lo que corresponde a una línea espectral Lorentziana.

c) Campos eléctricos al azar:

Es el caso en que, debido al defecto, el centro en estudio pierde la simetría de inversión, y sus estados no tienen paridad definida.

Resulta así:

$$\psi (\eta) = \exp (- A |\eta|^{3/2}) \quad (2.17)$$

correspondiendo a una línea espectral que se encuentra comprendida entre una Gaussiana y una Lorentziana.

d) Estructura extrahiperfina no resuelta (interacción magnética):

Originada por la interacción del momento magnético de spin con los momentos magnéticos de los iones vecinos al centro en estudio. Resulta:

$$\psi (\eta) = \exp (- A \eta^2) \quad (2.18)$$

lo que da lugar a una línea Gaussiana.

Estos resultados representan en realidad casos extremos y en general la forma de línea obtenida experimentalmente puede ser un caso intermedio entre los mencionados.

En efecto, la distinción entre las diversas formas de líneas debe hacerse en la "cola" de la línea espectral y puede suceder que existan mezclas de efectos como los antes descritos, de modo que es dificultoso encuadrarlos en algunos de los casos.

### 3 - Mediciones realizadas.

El espectro de RPE de  $\text{Ni}^{2+}$  como impureza sustitucional en posiciones cúbicas de OCa ha sido observado a  $1,3^\circ\text{K}$  en un espectrómetro convencional que opera en banda X (9.3 GHz). Para estudiar el ancho y la forma de la línea se tomaron las precauciones necesarias para evitar su deformación por saturación o excesiva amplitud de modulación.

La figura 2 muestra la variación angular observada para el ancho de la línea de RPE de  $\text{Ni}^{2+}:\text{OCa}$

Por cuadrados mínimos se obtuvo una variación angular dada por

$$(\Delta H_{1/2})^2 = a \Lambda^2 + b (1 - \Lambda^2)$$

$$a = 10,4 \times 10^4 \quad \text{Gauss}^2$$

$$b = 9,2 \times 10^4 \quad \text{Gauss}^2$$

y para las direcciones principales del cristal

$$(\Delta H_{1/2})_{[001]} = 322 \text{ Gauss} \quad \text{y} \quad (\Delta H_{1/2})_{[111]} = 175 \text{ Gauss}$$

Estos valores verificaron la relación (2.13.c) para la dirección  $[110]$ .

Los coeficientes de spin red para  $\text{Ni}^{2+}$  en OCa fueron determinados independientemente por experiencias de RPE con presiones uniaxiales en el mismo rango de temperaturas  $[9]$ . En este tipo de experiencias se miden directamente los corrimientos de las líneas espectrales en función de tensiones aplicada sobre la muestra  $[5, 10]$ , sus valores son

$$C_{11} = 760 \times 10^{-13} \frac{\text{cm}}{\text{dina}} \quad \text{y} \quad C_{44} = 570 \times 10^{-13} \frac{\text{cm}}{\text{dina}}$$

Con estos datos se determinó para el campo de tensiones internas

$$\langle X_{11}^2 \rangle^{1/2} = (235 \pm 20) \text{ Kgr/cm}^2$$

$$\langle X_{12}^2 \rangle^{1/2} = (183 \pm 20) \text{ Kgr/cm}^2$$

A partir de estos valores y de los correspondientes a las constantes elásticas del Cristal  $[11]$  es posible estimar para las deformaciones en las direcciones  $[001]$  y  $[111]$

$$\langle \epsilon_{[001]}^2 \rangle^{1/2} = (1,6 \pm 0,2) \cdot 10^{-4}$$

$$\langle \epsilon_{[111]}^2 \rangle^{1/2} = (2,4 \pm 0,2) \cdot 10^{-4}$$

Es decir que el cristal presenta distorsiones estáticas locales del orden del 0.02% que dependen de la dirección cristalina.

La forma de la línea de RPE observada se muestra en la figura 3 presentando un excelente ajuste con la forma Lorentziana. Entonces de acuerdo con los modelos descritos se puede atribuir el ensanchamiento de la línea a defectos puntuales. En efecto, nuestros experimentos muestran también la presencia de otras impurezas paramagnéticas en el cristal identificables como  $\text{Mn}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$ , lo que es consistente con la identificación del tipo de defecto via la forma de línea.

Este caso es muy particular puesto que permite una "doble" observación del tipo de defecto (solamente de los iones magnéticos).

#### 4 - Discusión.

El método de RPE permite determinar en forma cuantitativa la distribución de tensiones internas del cristal de OCa en la zona de la impureza  $\text{Ni}^{2+}$  paramagnético.

La forma de línea resultó ser Lorentziana lo que permite identificar el tipo de defecto responsable del ensanchamiento como puntuales, algunos de ellos reconocibles por ser magnéticos y aparecer conjuntamente en el espectro.

Resulta interesante comparar nuestros resultados con los obtenidos por Lewis y Stoneham [12] para el sistema  $\text{Ni}^{2+}:\text{OMg}$ . Estos autores obtienen

$$\langle \epsilon_{[001]}^2 \rangle^{1/2} = 2.0 \times 10^{-4}$$

$$\langle \epsilon_{[111]}^2 \rangle^{1/2} = 0.64 \times 10^{-4}$$

$$\frac{\langle \epsilon_{[001]}^2 \rangle^{1/2}}{\langle \epsilon_{[111]}^2 \rangle^{1/2}} = 3.1$$

y una forma de línea esencialmente Gaussiana. Con un modelo basado en una distribución isotrópica de dislocaciones [13]; con una densidad de  $5 \times 10^5 \text{ cm/cm}^3$  [14] Stoneham obtiene teóricamente:

$$\langle \epsilon_{[001]}^2 \rangle^{1/2} = 0,7 \cdot 10^{-4}$$

$$\langle \epsilon_{[111]}^2 \rangle^{1/2} = 0,3 \cdot 10^{-4}$$

$$\frac{\langle \epsilon_{[001]}^2 \rangle^{1/2}}{\langle \epsilon_{[111]}^2 \rangle^{1/2}} = 2,3$$

Un mejor acuerdo puede obtenerse suponiendo una densidad de dislocaciones de  $3 \times 10^6 \text{ cm/cm}^3$  valor que resulta algo elevado respecto del valor medido para  $\text{Fe}^{2+}$  en  $\text{O Mg}$ . La diferencia en un orden de magnitud puede explicarse en este caso considerando la historia previa del cristal, efecto de otras impurezas sobre las dislocaciones, estructura de subgrano; de todas maneras resulta que el efecto principal de la forma y ancho de línea es debido a la presencia de dislocaciones.

En nuestro caso los valores de  $\langle \epsilon^2 \rangle_{[001]}^{1/2}$ ,  $\langle \epsilon^2 \rangle_{[111]}^{1/2}$  conducen a

$$\frac{\langle \epsilon^2 \rangle_{[001]}^{1/2}}{\langle \epsilon^2 \rangle_{[111]}^{1/2}} \Bigg|_{(OCa)} = 0,65$$

y las diferencias entre este valor y los similares para  $Ni^{2+} : 0 Mg$  no pueden atribuirse a las diferencias de las constantes elásticas de ambos materiales. Esto puede comprobarse calculando el valor de

$$\frac{\langle \epsilon^2 \rangle_{[001]}^{1/2}}{\langle \epsilon^2 \rangle_{[111]}^{1/2}}$$

que se induciría en el  $0Mg$  por la presencia de un campo de tensiones iguales al obtenido para  $OCa$ : si el efecto fuera debido a la diferencia de constantes elásticos uno esperaría en este caso un valor

$$\frac{\langle \epsilon^2 \rangle_{[001]}^{1/2}}{\langle \epsilon^2 \rangle_{[111]}^{1/2}}$$

cercano a 0,65. El valor que resulta es 0,95; lo que no puede suponerse un buen acuerdo. Esta diferencia sugiere nuevamente que el defecto responsable del ensanchamiento, es distinto en ambos casos; lo que se corrobora por las diferentes formas de líneas encontradas.

Debe notarse que los valores  $\langle \chi_{11}^2 \rangle^{1/2}$  y  $\langle \chi_{12}^2 \rangle^{1/2}$  obtenidos en nuestro caso pueden considerarse válidos sólo en orden de magnitud para otras muestras del mismo sistema, dado que el estado de tensiones internas del cristal depende de la historia previa del material: métodos de crecimiento, tratamiento térmico, presencia de impurezas en otras concentraciones, etc.

En este sentido debe recalcarse que el método puede utilizarse mucho más ventajosamente mediante un estudio sistemático que permita correlacionar cuantitativamente el efecto de la densidad de defectos con los parámetros que identifican, tanto al ancho como a la forma de la línea espectral.

A P E N D I C E

Dado que el segundo momento de una curva Lorentziana es infinito [15], se propone el cálculo del segundo momento utilizando un corte en las alas de la curva, corte que puede determinarse utilizando como criterio el error experimental.

Si llamamos  $A_L$  al área de la curva Lorentziana,  $A_{LC}$  área de la curva Lorentziana cortada resulta

$$A_L - A_{LC} = \Delta (a)$$

donde  $(\pm a)$  es la coordenada de corte como se indica en la figura 4: y  $\Delta (a)$  se determina considerando el error experimental. Si llamamos  $J_m$  a la altura de la línea en el centro de la línea y  $\Delta H_{1/2}$  al ancho de la línea a altura mitad

$$A_L = \frac{\pi}{2} \cdot J_m \cdot \Delta H_{1/2} \quad (A.1)$$

y

$$\Delta (a) = \frac{2}{\pi} A_L \cot^{-1} \left( \frac{2a}{\Delta H_{1/2}} \right)$$

luego

$$\frac{\Delta (a)}{A_L} \cong 2 \frac{\delta (\Delta H_{1/2})}{\Delta H_{1/2}}$$

tomando para  $2 \frac{\delta (\Delta H_{1/2})}{\Delta H_{1/2}} \cong 0.1$  como valor típico (A.2)

el segundo momento de la Lorentziana cortada resulta

$$\langle H^2 \rangle = \frac{1}{4} (\Delta H_{1/2})^2 \left[ \frac{\frac{2a}{\Delta H_{1/2}}}{\frac{\pi}{2} - \cot^{-1} \left( \frac{2a}{\Delta H_{1/2}} \right)} - 1 \right] \quad (A.3)$$

resulta así con el valor dado por (A.2) para la constante  $K$  definida en la sección 2 ec. (2.10)

$$K \approx \frac{8}{7}$$

$$\text{con } \frac{2a}{\Delta H_{1/2}} = 6.3$$

## BIBLIOGRAFIA

- [1] C.P. Slichter "The principles of Magnetic Resonance" (Harper y Row, New York, 1963).
- [2] G.E. Pake "Paramagnetic Resonance" (W.A. Benjamin, New York 1962).
- [3] J. Owen y J.H.M. Thornley, Rep. Prog. Phys., V. 29 (1966) p. 675.
- [4] A.A. Manenkov y R. Orbach "Spin Lattice Relaxation in Ionic Solids" (Harper y Row, New York, 1966).
- [5] E. Feher, Phys. Rev. V. 136 A (1964) p. 145.
- [6] S.R.P. Smith, F. Dravniecks y J.E. Wertz. Phys. Rev. V 178, (1969) p. 471.
- [7] A.M. Stoneham, Rev. Mod. Phys. V. 41, (1969) p. 82.
- [8] C.P. Poole "Electron Spin Resonance" (Interscience Publ. New York, 1967).
- [9] R. Calvo, Z. Sroubek, R.S. Rubins y P. Zimmermann, Phys. Letters V.27 A, (1968) p. 143.
- [10] R. Calvo, (Tesis: Instituto de Física J.A. Balseiro, Univ. de Cuyo, 1969).
- [11] H.E. Hite y R.J. Kearney, J. Appl. Phys. V. 38 (1967) p. 5424.
- [12] M.F. Lewis y A.M. Stoneham, Phys. Rev. V. 164, (1967) p. 271.
- [13] A.M. Stoneham, Proc. Phys. Soc. V. 89, (1966) p.909.
- [14] A.R. Lang y V.F. Miuskov, Phil. Mag. V. 10, (1964) p. 263.
- [15] C. Kittel y E. Abrahams, Phys. Rev. V. 90, (1953) p. 238.

LEYENDAS BAJO LA FIGURA

FIGURA 1 - Orientación del campo magnético exterior  $H_0$  respecto de los ejes cristalográficos.

FIGURA 2 - Variación angular del ancho de línea espectral para  $0 \text{ Ca: Ni}^{2+}$ .

FIGURA 3 - Espectro REP de un cristal de  $0 \text{ Ca}$  con impurezas de  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$  y  $\text{Fe}^{3+}$ . Se indica el excelente acuerdo entre la línea experimental (trazo lleno) y una forma de línea Lorentziana.

FIGURA 4 - Forma de línea Lorentziana truncada.

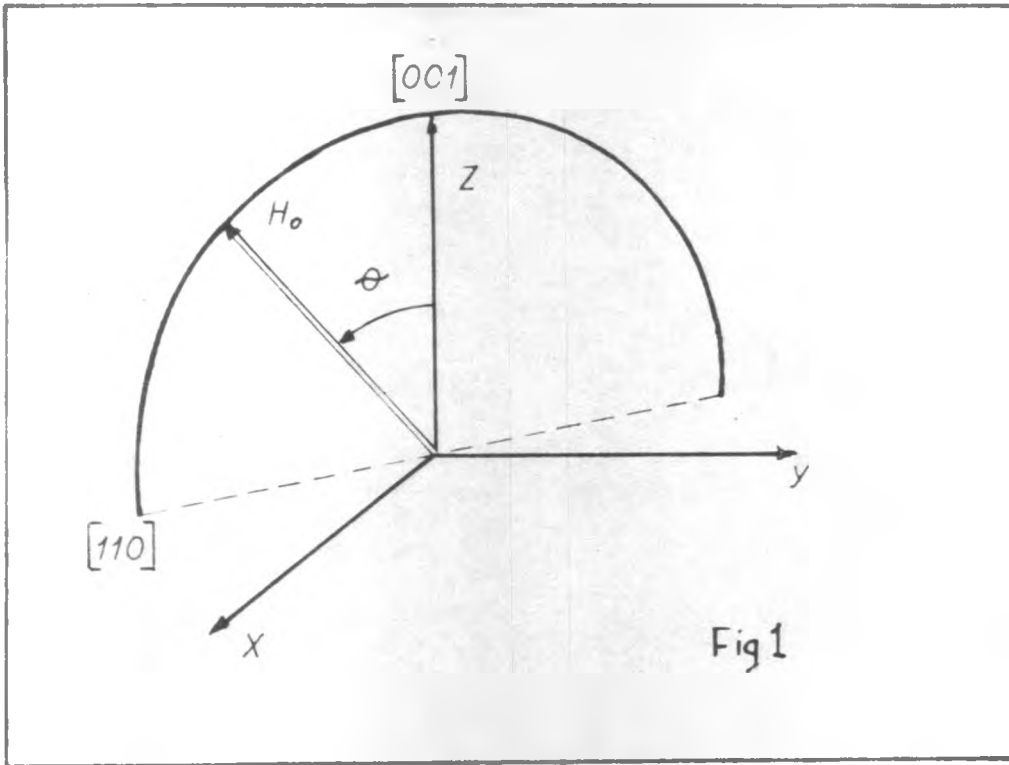


Fig1

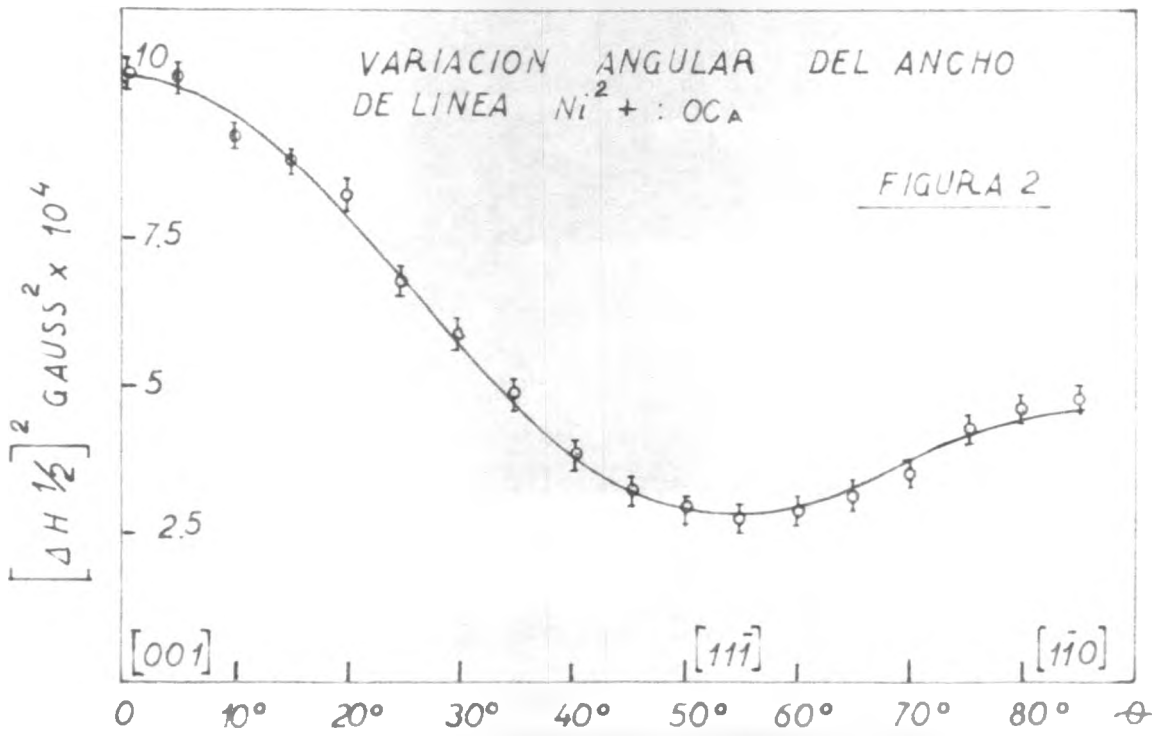


Fig 3

