31 JUL 2001

LIBRARY AND INFORMATION CENTER
MAHIDOL UNIVERSITY

# CRYSTAL FIELD CALCULATIONS AND ELECTRON SPIN RESONANCE STUDY OF IRON ION IN SAPPHIRE

CHARUAYRAT YAOKULBODEE

อภิธานนาการ
จาก
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยมหิดล

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILMENT

OF THE REQUIREMENTS FOR

THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE (PHYSICS)

FACULTY OF GRADUATE STUDIES

MAHIDOL UNIVERSITY

2001

ISBN 974-04-0290-9

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

TH
C486c
2001
C.2

Copyright by Mahidol University

4037830 SCPY/M : MAJOR: PHYSICS; M.Sc. (PHYSICS)
KEY WORDS : CRYSTAL FIELD CALCULATION / ELECTRON SPIN RESONANCE

CHARUAYRAT YAOKULBODEE : CRYSTAL FIELD CALCULATIONS AND ELECTRON SPIN RESONANCE STUDY OF IRON ION IN SAPPHIRE. THESIS ADVISORS: TANAKORN OSOTCHAN, Ph.D., PONGTIP WINOTAI, Ph.D.,70p. ISBN 974-04-0290-9

In this research, the impurity ion ($Fe^{3+}$) was substituted into sapphire ($Al_2O_3$) and were studied theoretically and experimentally. A natural sapphire, violet red in color, was obtained from Tanzania. The polished crystal was annealed in an oxygen atmosphere for 12 hours at 1200, 1300, 1400, 1500°C and 1600°C subsequently and results in the color change to red and better clarity.

Electron spin resonance (ESR) spectra in X-band (~9.05 GHz) were recorded by mounting the crystal with the c-axis both perpendicular and parallel to the magnetic field direction. The spectra were recorded in the range of 0 degree to 180 degrees for every 15 degrees of rotation angle. There are five main ESR absorption peaks occurring at the resonance magnetic field values of about 86, 149, 300, 505 and 705 mT where c-axis is perpendicular to the applied magnetic field direction. In most of the cases these five peaks remained almost constant while being rotated around the axis. While for the case of the c-axis parallel to the applied magnetic field direction, all the five main peaks strongly depend on the rotation angle. However, the spectra at various rotating angles have inverse symmetry about the angle defined as a 90 degree angle. For theoretical calculations we calculated the energy levels of the $Fe^{3+}$ ions substituting for $Al^{3+}$ for the case of $Fe^{3+}$ ion replacing at the $Al^{3+}$ site and the $Fe^{3+}$ ion being displaced by 0.1, 0.2 and -0.1 Å along c-axis.

The results demonstrated two unshifted energy levels at 52000 and 32000 $cm^{-1}$ while some others increase or decrease as the location of impurities displaced. From the magnetic field and spin interaction Hamiltonian, the splitting of ground state energy levels were calculated as a function of applied magnetic field for both $Fe^{3+}$ and $Cr^{3+}$ impurity ions. A computer program written by Mathematica was used to iteratively solve for the resonance magnetic field as a function of the rotating angle. These calculated values are in good agreement with measured ESR spectra.

Copyright by Mahidol University

4037830 SCPY/M: สาขาวิชา: ฟิสิกส์; วท.ม. (ฟิสิกส์)

จรวยรัตน์ เหย่ากุลบดี : การคำนวณสนามของผลึกและการศึกษาคุณสมบัติของไอออนของเหล็กในพลอยโดยวิธีอิเล็กตรอนสปินเรโซแนนซ์ (CRYSTAL FIELD CALCULATIONS AND ELECTRON SPIN RESONANCE STUDY OF IRON ION IN SAPPHIRE). คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์ : ธนากร โอสถจันทร์, Ph.D., พงศ์ทิพย์ วิโนทัย, Ph.D., 70 หน้า.
ISBN 974-04-0290-9

วิทยานิพนธ์นี้ศึกษาการแทนที่ของไอออนมลทินที่ผสมอยู่ในพลอยทั้งในเชิงทฤษฎีและการทดลอง การศึกษานี้ใช้พลอยที่ได้จากประเทศแทนซาเนีย สีของพลอยที่ใช้เป็นสีแดงออกม่วง นำพลอยที่ได้มาขัด แล้วไปเผาที่อุณหภูมิ 1200, 1300, 1400, 1500 และ 1600 องศาเซลเซียส ในบรรยากาศของออกซิเจน การเปลี่ยนแปลงที่สังเกตได้คือพลอยจะมีลักษณะเป็นสีแดงมากขึ้น

ทำการวัดอิเล็กตรอนสปินเรโซแนนซ์ ในกรณีให้แกนผลึกตั้งฉากกับทิศทางของสนามแม่เหล็ก และกรณีที่แกนผลึกขนานกับทิศทางของสนามแม่เหล็ก โดยมีการเปลี่ยนมุมระหว่างแกนผลึกกับทิศทางของสนามแม่เหล็ก จาก 0 ถึง 180 องศา และวัดทุก 15 องศา จากการทดลองผลที่ได้คือในกรณีที่แกนผลึกตั้งฉากกับทิศของสนามแม่เหล็กเกิดสเปกตรัมมีพีคที่ตรงกับตำแหน่งของสนามแม่เหล็ก 5 ค่า คือ 86, 149, 300, 505 และ 705 มิลลิเทสลา ค่าตำแหน่งของพีคที่ได้ส่วนใหญ่ไม่เปลี่ยนเมื่อทำการเปลี่ยนมุมในการวัด แต่ในกรณีที่สนามแม่เหล็กขนานกับแกนผลึกจะสังเกตการเปลี่ยนแปลงได้ชัดเจนเมื่อมีการเปลี่ยนมุมในการวัด อย่างไรก็ตามตำแหน่งพีคที่เลื่อนไปและมีลักษณะสมมาตรรอบแกนที่กำหนดให้เป็นมุมหมุน 90 องศา

ในส่วนของการคำนวณได้คำนวณระดับพลังงานของไอออนของเหล็กในพลอย ในกรณีที่ไอออนเหล็ก ($Fe^{3+}$) แทนที่ตำแหน่งเดิมของอะลูมิเนียมไอออน และในกรณีที่ไอออนเหล็กขยับจากตำแหน่งเดิมขึ้นไป 0.1, 0.2 อังสตรอม และขยับลง 0.1 อังสตรอม ตามแนวแกนผลึก ผลที่ได้แสดงว่าระดับของพลังงานของไอออนของเหล็กในพลอยขึ้นกับตำแหน่งของไอออนของเหล็ก ระดับพลังงานที่มีค่าคงที่คือ 52000 และ 32000 $cm^{-1}$ ส่วนระดับพลังงานอื่นมีค่าเพิ่มขึ้นหรือลดลงขึ้นตามตำแหน่งที่แทนที่ และได้คำนวณระดับการแยกพลังงานสถานะของทั้งไอออนเหล็กและไอออนโครเมียมจากฮาร์มิลโตเนียนที่รวมผลอันตรกิริยาระหว่างสปินกับสนามแม่เหล็ก โปรแกรมคำนวณได้เขียนด้วยโปรแกรม Mathematica และค่าที่ได้จากการคำนวณสามารถนำมาเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการวัด ESR

Copyright by Mahidol University