

Energy Level Calculation of Fe³⁺ Paramagnetic Impurity Ion in a LiTaO₃ Single Crystal

Tae Ho Yeom*, Dal Hoo Yoon, and Soo Hyung Lee

Department of Laser and Optical Information Engineering, Cheongju University, Cheongju 360-764, Korea

(Received 9 June 2014, Received in final form 18 June 2014, Accepted 19 June 2014)

Ground state energy levels of the Fe³⁺ paramagnetic impurity ion in stoichiometric LiTaO₃ and in congruent LiTaO₃ single crystals were calculated with electron paramagnetic resonance constants. Energy levels between six energy levels were obtained with spectroscopic splitting parameter g and zero field splitting constant D for Fe³⁺ ion. The energy diagrams of Fe³⁺ ion were different from different magnetic field directions ([100], [001], [111]) when magnetic field increases. The calculated ZFS energies of Fe³⁺ ion in stoichiometric and congruent LiTaO₃ single crystals for $|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$ and $|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$ transitions were 12.300 GHz and 6.150 GHz, and 59.358 GHz and 29.679 GHz, respectively. It turns out that energy levels of Fe³⁺ paramagnetic impurity in LiTaO₃ crystal are different from different crystal growing condition.

Keywords : BiVO₄ single crystal, Fe³⁺ ion, electron paramagnetic resonance, energy level

LiTaO₃ 단결정 내의 Fe³⁺ 상자성 불순물 이온에 대한 에너지 준위 계산

염태호* · 윤달호 · 이수형

청주대학교 레이저광정보공학과, 충북 청주시 상당구 대성로 586, 360-764

(2014년 6월 9일 받음, 2014년 6월 18일 최종수정본 받음, 2014년 6월 19일 게재확정)

정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정 및 비정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정 내에 불순물로 도핑된 Fe³⁺ 상자성 불순물 이온의 바닥 상태에서의 에너지 준위를 계산하였다. LiTaO₃ 단결정 내에서 육방정계 대칭성을 갖는 Fe³⁺ 이온의 전자 상자성 공명 상수인 분광학적 분리인자 g 및 영자기장 갈라지기 D 값을 이용하여 6개의 에너지 준위 사이의 에너지 준위를 계산하였다. 자기장을 결정학적 주축 ([100], [001], [111])과 나란하게 가하여 자기장을 증가시켜 감에 따라 얻은 에너지 준위 갈라지기는 자기장을 가한 방향에 따라서 서로 다른 값을 나타내었다. $|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$ 및 $|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$ 사이의 전이에서 계산한 영자기장 갈라지기 값은 정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정과 비정비조성으로 성장시킨 단결정의 경우에 각각 12.300 GHz, 6.150 GHz 와 59.358 GHz, 29.679 GHz이다. 결정성장 조건에 따라 에너지 준위가 상당히 다른 것으로 나타났다.

주제어 : LiTaO₃ 단결정, Fe³⁺ 이온, 전자 상자성 공명, 에너지 준위

I. 서 론

LiTaO₃(lithium tantalate)와 LiNbO₃(lithium niobate) 단결정은 강유전성, 압전성 및 전기-광학적 성질의 여러 응용으로 인하여 매력적인 물질로 알려져 있다. 홀로그래프 저장장치로 사용될 수 있는 광굴절 효과는 전이금속원소 불순물 같은 결함의 존재와 밀접한 연관이 있는 것으로 보인다[1-6]. LiTaO₃ 단결정은 1965년 광전(electro-optic) 및 압전(piezoelectric) 소

자 응용을 위하여 Czochralski 방법으로 처음 육성되었다[7]. 그 후 많은 연구자들에 의하여 성장과 물성에 관한 보고가 진행되어 왔다[8-10]. 단결정을 성장할 때 여러 종류의 활성 이온들을 도핑하여 단결정을 응용하는데, 단결정 내 이온들의 이온 상태, 국소 대칭성, 에너지준위 및 첨가 불순물들이 어느 자리를 치환하고 들어가는지는 매우 중요한 정보이다.

LiTaO₃ 단결정 내의 불순물 자리와 관련된 정보는 강유전성 결정의 비선형 특성을 이해하는데 중요하다. 특히, Fe³⁺ 첨가는 광굴절 효과에 중용한 역할을 하고 있다[2, 6]. 광굴절 효과에 대해 더 많은 이해를 하기 위해 LiTaO₃와 LiNbO₃에서 불순물 Fe³⁺의 결합구조에 대한 정확한 지식이 필요하다.

© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.

*Corresponding author: Tel: +82-43-229-8555,

Fax: +82-43-229-8432, e-mail: thyeom@cju.ac.kr

또한 비 대칭성 특유의 성질인 압전성을 이용한 표면탄성과 (SAW: surface acoustic wave) 필터는 1980년대에 LiTaO₃가 가정용 텔레비전, VTR, 또는 이동 통신용 기기 등에 쓰여짐으로써 실용화되었다[11]. 일반화된 진동자로써 시계에 이용된 인공합성 수정이 이제까지는 유일하게 실용화된 결정이었지만 휴대용 전화 등의 고주파 부품으로서 강유전체인 LiNbO₃, LiTaO₃가 현재 가장 주목 받고 있다.

LiTaO₃는 열에 대한 응력이 크기 때문에 결정육성 도중에 깨지기 쉽고 열전도율이 금속에 비해 작아 성장도중 형상이 고르지 않은 상태로 육성되는 경우가 생긴다. 그리고 육성도중 결정내부의 조성 균질화가 어렵다는 점 때문에 LiNbO₃에 비하여 상대적으로 연구가 미비한 상태이다. LiTaO₃ 단결정에 대해서는 Cr³⁺ 이온에 관한 전자 상자성 공명 연구[12, 13] 그리고 중첩이론을 통한 상자성 불순물 이온에 대한 이론적 계산 논문[14, 15]이 있다.

전자 상자성 공명은 단결정 내의 상자성 불순물의 국소 대칭성 및 치환자리 등의 정보를 주고, 감도가 아주 좋은 유용한 실험기술이다. 그간 LiTaO₃ 단결정 내에 불순물로 Fe³⁺ 이온을 도핑 시켜서 비정비조성(congruent) 방법[16]과 정비조성(stoichiometric) 방법[17]으로 성장시킨 두 종류의 LiTaO₃ 단결정에 대한 Fe³⁺ 불순물 이온에 대한 전자 상자성 공명 연구가 발표되었다. 본 연구에서는 위의 정비조성 및 비정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정에 도핑된 Fe³⁺ 이온에 대한 전자 상자성 공명 실험결과를 이용하여 LiTaO₃ 단결정 내의 Fe³⁺ 이온의 바닥 상태 에너지 준위를 계산하고자 한다. 이 계산에서는 두 논문에서 발표된 Fe³⁺ 이온의 분광학적 분리인자 g 와 영자기장 갈라지기(zero-field splitting) 상수를 사용하여 유효 스핀하밀토니안으로 계산하였다.

II. 결정 구조

LiTaO₃는 제조 시에 정비조성과 비정비조성 두 가지로 나뉘어 진다. 정비조성은 Li₂O : Ta₂O₅ = 1 : 1의 조성비를 뜻한다. 비정비조성은 많은 경우에 다른 비율을 보이고 있지만 Li₂O : Ta₂O₅ = 48.6 : 51.4가 일반적인 몰비로 받아들여지고 있다. 그런데 비정비조성 단결정의 경우에는 비정비조성인 관계로 많은 고유 결함을 갖는다. 이러한 고유 결함과 첨가된 불순물들은 광손상과 밀접한 관련이 있다. 또한 철족 불순물들과 그 외의 결함들이 단결정 내에 존재하게 되면 광학적, 전기적 특성들이 크게 영향을 받는다고 알려져 있다[18].

LiTaO₃ 단결정 물질이 강유전성을 갖고 있다는 것이 밝혀졌고[19], 이에 대한 결정 구조는 Abrahams 등[20, 21]에 의하여 자세히 연구되었다. LiTaO₃ 단결정은 LiNbO₃ 단결정과 동등한 결정 구조를 갖고 있고, 비슷한 물리적 성질을 갖

고 있다. 그러나, Curie 온도와 녹는 온도는 LiTaO₃ 단결정의 경우 각각 893 K와 1833 K이고, LiNbO₃ 단결정의 경우는 각각 1470 K와 1533 K로 상당히 다른 것으로 알려졌다. LiTaO₃ 단결정은 공간군 R3c에 속하는 육방정계 구조를 갖고 있으며, 단위 세포 당 6개의 분자로 이루어져 있다. 이 단결정의 격자상수는 $a = 0.5154$ nm, $c = 1.3781$ nm이다. 이 양이온들은 [111] 방향으로 Ta, 빈자리, Li, Ta, 빈자리, Li, 등의 순서로 배열하고 있으며, 결정학적 주축인 c -축을 따라서 Li⁺ 이온과 Ta⁵⁺ 이온이 약간 왜곡되어 있는 산소 팔면체 내에 위치해 있다. 한편, O²⁻ 이온은 c -축과 수직한 면에 놓여있다[20-24].

III. 이론 및 에너지 준위 계산

Fe³⁺ 이온이 LiTaO₃ 단결정 내에 들어가 있을 때 Fe³⁺ 이온은 이웃하고 있는 이온들에 의하여 결정장을 받게 된다. 일반적으로 미세구조는 결정장, 스핀-궤도 상호작용, 스핀-스핀 상호작용 때문에 일어나게 된다. Fe³⁺ 이온은 전자배열이 $3d^5$ 이고 전자스핀 $S = 5/2$ 인 S-상태의 이온으로 ${}^6S_{5/2}$ 의 바닥 다중항을 갖고 있다. Fe³⁺ 이온의 에너지 준위를 계산할 때, 분광학적 분리인자 g 및 영자기장 갈라지기 상수(B_k^q)로 구성되어 있는 유효 스핀하밀토니안을 써서 계산하였다[25, 26]. 즉,

$$H = H_Z + H_{ZFS} = \beta \vec{B} \cdot \vec{g} \cdot \vec{S} + \sum B_k^q O_k^q. \quad (1)$$

여기서 H_Z 는 Zeeman 항이고, H_{ZFS} 은 영자기장 갈라지기 항, 즉 미세구조 항이다. 또한 β 는 보어마그네톤, \vec{B} 는 외부자기장 벡터, \vec{g} 는 분광학적 분리인자 텐서, \vec{S} 는 전자스핀 연산자, 그리고 B_k^q 는 연장된 Stevens 연산자 Q_k^q 와 관계 있는 영자기장 갈라지기 상수이다.

LiTaO₃ 단결정 내에서 육방정계 대칭성을 갖는 Fe³⁺ 이온의 영자기장 갈라지기 항의 하밀토니안은 다음과 같이 나타낸다[27].

$$H_{ZFS} = B_2^0 O_2^0 \quad (2)$$

여기서 스핀하밀토니안을 사용할 때 실험실 좌표계를 소문자 x, y, z 로 하였고 이는 각각 결정학적 주축인 $a-, b-, c$ -축에 나란하게 택하였다. 영자기장 갈라지기 상수의 이차 항은 논문에 따라 여러 가지로 표현되는데 그들 사이의 관계는 $D = b_2^0 = 2B_2^0$ 이다.

Fe³⁺ 이온을 도핑 시켜 성장한 LiTaO₃ 단결정 내의 Fe³⁺ 이온의 전자 상자성 공명 상수를 사용하여 Fe³⁺ 공명중심에 대한 바닥상태에서의 에너지 준위를 계산하였다. 먼저 정비조성 방법으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정 내의 Fe³⁺ 이온의 경우에는 전자 상자성 공명 상수인 분광학적 분리인자 $g_{xx} = g_{yy} =$

1.99, $g_{zz} = 2.55$ 및 영자기장 갈라지기 $D = 2050$ MHz값[17]을 사용하였다. Fe^{3+} 이온의 전자 스핀이 외부에서 자기장을 가하지 않았을 때 ($B = 0$)에도 에너지 준위가 $|\pm 5/2\rangle$, $|\pm 3/2\rangle$, $|\pm 1/2\rangle$ 로 분리되어 있는데 이를 영자기장 갈라지기라 한다. 영자기장 갈라지기는 결정장, 스핀-스핀 상호작용, 스핀-궤도 상호작용에 의하여 생기게 된다. 식 (1)과 (2)를 사용한 계산에서 얻은 영자기장 갈라지기 값은 $|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$ 사이가 12.300 GHz 이고, $|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$ 사이가 6.150 GHz이다. $LiTaO_3$ 단결정 내에 들어있는 Fe^{3+} 이온의 국소대칭성은 삼방정계인 C_3 이다. 자기장을 a -축과 b -축으로 각각 가하여 자기장이 증가함에 따라서 계산한 에너지 준위 값은 서로 같게 나타났는데, 이는 $LiTaO_3$ 단결정이 육방정계 구조를 갖고 있어 결정학적 주축의 길이 a , b 가 서로 같기 때문으로 판단된다. 그러나 자기장을 c -축에 나란하게 가해서 계산한 에너지 준위 값은 a -축과 b -축으로 가했을 때의 값과 서로 다른데, 이는 결정학적 주축 c 값이 a , b 와 서로 다르기 때문이다. 정비조성 $LiTaO_3$ 단결정의 경우에 외부에서 가한 자기장 B 가 결정학적 주축인 $[100]$, $[001]$, $[111]$ 방향에 나란하게 가하여 계산한 에너지 준위를 각각 Fig. 1의 (a), (b), (c)에 나타내었다. 자기장 값이 0인 경우에는 결정학적 주축의 방향에 관계 없이 같은 에너지 갈라지기(영자기장 갈라지기)를 보여주고 있으나, Fig. 1에서 보듯이 자기장 값이 커짐에 따라서 서로 다른 에너지 갈라지기를 보이는 것을 알 수 있다. Fe^{3+} 이온은 유효 전자 스핀이 $S = 5/2$ 이므로 자기 양자수 $m_s = 5/2 \sim -5/2$ 를 갖는다. 이를 Fig. 1의 오른쪽에 나타내었는데, 숫자 1~6은 자기 양자수 $|\pm 5/2\rangle$ 부터 $|\pm 5/2\rangle$ 에 대응되는 값을 나타낸다.

다음은 비정비조성 방법으로 성장시킨 $LiTaO_3$ 단결정의 경우에 Fe^{3+} 이온의 바닥상태에서의 에너지 준위 값을 계산하였다. 이 때에는 이미 연구 보고된 전자 상자성 공명 상수인 분광학적 분리인자 $g_{xx} = g_{yy} = g_{zz} = 1.995$ 및 영자기장 갈라지기 $D = 9900$ MHz 값[16]을 사용하였다. 식 (1)과 (2)를 사용한 계산에서 얻은 영자기장 갈라지기 값은 $|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$ 사이가 59.358 GHz이고, $|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$ 사이가 29.679 GHz이다. 여기서도 가해진 자기장 값이 0인 경우에는 결정의 방향과 관계없이 영자기장 갈라지기 값이 같은 것을 볼 수 있다. 또한 자기장이 a -축과 b -축에 나란하게 가하였을 때는 자기장이 증가함에 따라서 에너지 준위가 서로 같게 나왔지만, c -축에 자기장을 가하였을 때는 자기장이 증가함에 따라서 에너지 준위가 전혀 다르게 나왔다. 이 역시 결정구조에 따른 것이다. 외부에서 가한 자기장 B 가 결정학적 주축인 $[100]$, $[001]$, $[111]$ 방향에 나란할 때의 에너지 준위를 각각 Fig. 2의 (a), (b), (c)에 나타내었다. $LiTaO_3$ 단결정의 대칭성에 따라서 Fig. 2에서 볼 수 있듯이 자기장이 결정학적 주

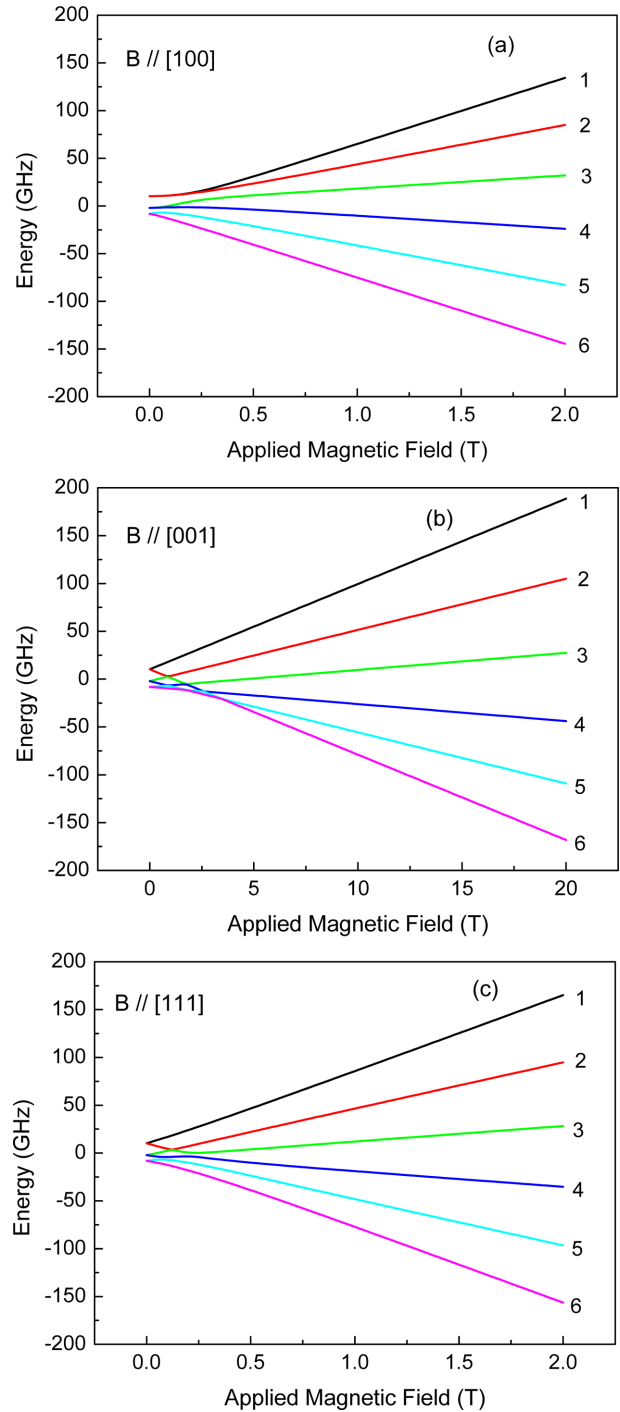


Fig. 1. (Color online) The energy-level diagram of Fe^{3+} paramagnetic ion in a stoichiometric $LiTaO_3$ single crystal when magnetic field B is applied to the crystallographic (a) $[100]$, (b) $[001]$, and (c) $[111]$ direction.

축인 $[100]$, $[001]$, $[111]$ 축과 나란하게 가해졌을 때에 자기장의 증가에 따라서 서로 다른 에너지 준위 갈라지기를 갖고 있는 것을 보여주고 있다. 자기 공명이 일어나는 원리는 그림에서와 같이 외부에서 가해주는 자기장에 의하여 Zeeman

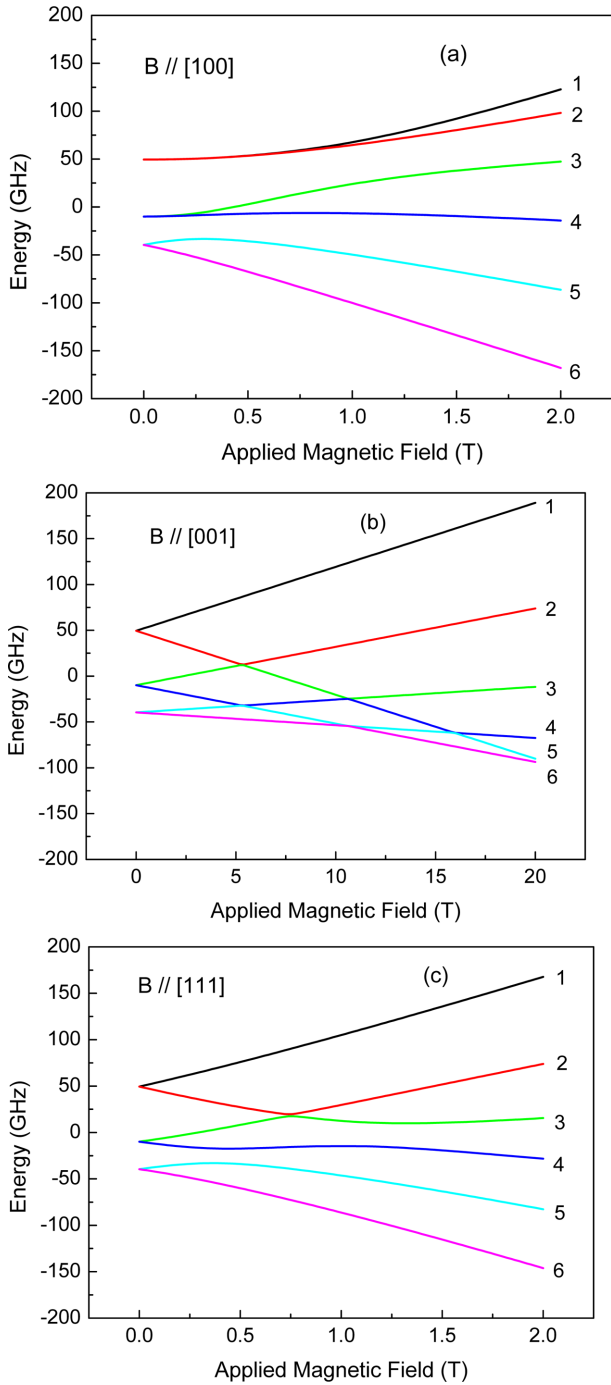


Fig. 2. (Color online) The energy-level diagram of Fe³⁺ paramagnetic ion in a congruent LiTaO₃ single crystal when magnetic field *B* is applied to the crystallographic (a) [100], (b) [001], and (c) [111] direction.

에너지 분리가 일어나고 이들 갈라진 에너지 준위와 일치하는 에너지가 들어왔을 때 전자 상자성 공명이 일어나 공명흡수선을 주게 되는 것이다.

Fig. 1 및 Fig. 2는 모두 LiTaO₃ 단결정에 도핑된 Fe³⁺ 상자성 불순물의 에너지 준위를 계산한 것이다. 그러나 이 둘

사이에 에너지 준위가 서로 다르게 나타나는 이유는 Fig. 1의 시료는 LiTaO₃ 결정성장 시 정비조성으로 성장 시킨 것이고, Fig. 2의 시료는 단결정 성장 시 비정비조성으로 성장시켰기 때문에 성장 조건이 서로 상이하기 때문인 것이다. 비정비조성으로 성장할 때는 특히Li 결함(Li⁺ 빈자리)이 상당히 많이 생기는 것으로 알려졌다. 그에 따라서 Fe³⁺ 이온의 바닥상태에서의 에너지 준위에 큰 차이가 생긴 것으로 판단된다.

IV. 결 론

Czochralski 방법으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정 내에 불순물로 들어가 있는 Fe³⁺ 상자성 이온에 대한 전자 상자성 공명 연구에 의하면, Fe³⁺ 이온은 결정성장 조건에 따라서 모 단결정 내에서 Li⁺ 또는 Ta³⁺ 이온을 치환 한다고 보고되어 있다. 본 연구에서는 LiTaO₃ 단결정 내에서 육방정계 대칭성을 갖는 Fe³⁺ 이온의 분광학적 분리인자 *g* 및 영자기장 갈라지기 *D* 값을 이용하여 바닥상태에서의 에너지를 계산하였다. 시료는 두 가지를 선택하여 각각 계산하였는데, Fe³⁺ 상자성 불순물을 도핑하여 정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정과 비정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정 내의 Fe³⁺ 이온에 대한 에너지 준위를 계산하였다. 자기장을 결정학적 주축인 *a*- 및 *b*-축에 나란하게 가해졌을 때의 에너지 준위는 정비조성 및 비정비조성 단결정에서 모두 같게 나왔는데, 이는 LiTaO₃ 단결정의 구조에서 결정 대칭성과 일치하는 것으로 나타난다. 그러나 자기장이 결정학적 주축인 [100], [001] 및 [111] 축에 서로 다르게 가해졌을 때에는 Fe³⁺ 이온의 바닥상태에서의 에너지 준위가 자기장이 증가함에 따라서 서로 다르게 나타났는데, 이 또한 결정학적 구조와 일치하는 결과이다.

정비조성으로 성장시킨 단결정 및 비정비조성으로 성장된 단결정에서 자기장이 0인 경우에는 결정학적 주축의 방향에 무관하게 Fe³⁺ 상자성 불순물의 에너지 준위가 같게 나왔다. 그러나 자기장이 0부터 2 T까지 점점 증가함에 따라 자기장이 결정학적 주축의 [100], [001] 및 [111] 축에 가해졌을 때에는 에너지 준위가 서로 다를 뿐만 아니라 각 에너지 준위는 더욱 벌어졌다. Fe³⁺ 공명 중심의 영자기장 갈라지기 에너지 값은 정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정의 경우에는 |± 5/2> ↔ |± 3/2> 사이 및 |± 3/2> ↔ |± 1/2> 사이에서 각각 12.300 GHz와 6.150 GHz이었고, 비정비조성으로 성장시킨 LiTaO₃ 단결정의 경우에는 |± 5/2> ↔ |± 3/2> 사이 및 |± 3/2> ↔ |± 1/2> 사이에서 영자기장 갈라지기 값이 각각 59.358 GHz와 29.679 GHz이었다. 같은 Fe³⁺ 상자성 이온이 도핑된 LiTaO₃ 단결정일지라도 결정 성장 조건에 따라서 서로 완전히 다른 에너지 준위를 얻었는데, 이는 결정 성장 방법에 따라서 LiTaO₃ 단결정 내에 존재하는 Li⁺ 결핍이 심하게 차이

가 나는 것이 기인한다고 판단된다.

References

- [1] M. E. Lines and A. M. Glass, Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials, Clarendon press, Oxford (1977).
- [2] E. Krätzig and R. Orłowski, Appl. Phys. **15**, 133 (1978).
- [3] H. Kurz, E. Krätzig, W. K. Keune, H. Engelmann, U. Gonser, B. Dischler, and A. Räuber, Appl. Phys. **12**, 355 (1977).
- [4] F. Mehran and B. A. Scott, Solid State Commun. **11**, 15 (1972).
- [5] A. P. Pechney, Sov. Phys. Solid State, **27**, 923 (1985).
- [6] E. Krätzig and R. Orłowski, Opt. Quant. Elect. **12**, 495 (1980).
- [7] A. A. Ballman, J. Am. Ceram. Soc. **48**, 112 (1965).
- [8] S. C. Abrahams and J. L. Bernstein, J. Phys. Chem. Solids, **28**, 1685 (1967).
- [9] S. Matsumura, J. Cryst. Growth, **51**, 41 (1981).
- [10] H. Chen, H. Xia, J. Wang, J. Zhang, J. Xu, and S. Fan, J. Cryst. Growth, **256**, 219 (2003).
- [11] D. W. Rudd and A. A. Ballman, Solid State Technology, January, 52 (1974).
- [12] S. W. Ahn, J. S. Kim, S. H. Choh, and T. H. Yeom, J. Korean Phys. Soc. **27**, 535 (1994).
- [13] S. H. Choh, T. H. Yeom, and S. W. Ahn, Bull. Mag. Resonance, **17**, 198 (1995).
- [14] T. H. Yeom, S. W. Ahn, and S. H. Choh, J. Korean Phys. Soc. **29**, 107 (1996).
- [15] T. H. Yeom J. Phys.: Condens. Matter **13**, 10471 (2001).
- [16] H. Söthe, L. G. Rowan, and J.-M. Spaeth, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 3591 (1989).
- [17] S. G. Min, T. H. Yeom, S. H. Lee, M. K. Lee, H. K. Shin, Y. M. Yu, T. H. Kim, and S. C. Yu, J. Korean Magn. Soc. **13**, 171 (2003).
- [18] E. Krätzig and O. F. Schimer, in Photo-refractive Materials and Their Applications (Edited by P. Gunter and J. P. Huignard), Topics in Applied Physics, 61, Springer, Berlin (1988) P. 131.
- [19] B. T. Matthias and J. P. Remeika, Phys. Rev. **76**, 1886 (1949).
- [20] S. C. Abrahams and J. L. Bernstein, J. Phys. Chm. Solids **28**, 1685 (1967).
- [21] S. C. Abrahams, W. C. Hamilton, and A. Sequeira, J. Phys. Chem. Solids **28**, 1693 (1967).
- [22] C. Y. Chen, K. L. Sweeney, and L. E. Halliburton, Phys. Stat. Sol. **81**, 253 (1984).
- [23] S. C. Abrahams, E. Buehler, C. Hamilton, and S. J. Laplaca, J. Phys. Chem. Solids **34**, 521 (1973).
- [24] S. C. Abrahams, J. M. Reddy, and J.L. Bernstein, J. Chem. Phys. Solids **27**, 997 (1966).
- [25] A. Abragam and B. Bleaney, Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Clarendon Press, Oxford, New York and Dover (1970 and 1986).
- [26] C. Rudowicz, Magnetic Res. Rev. **13**, 1 (1987); Erratum: **13**, 335 (1988).
- [27] S. K. Misra and C. Rudowicz, Phys. Status Solidi B **147**, 677 (1988).