

ВЛИЯНИЕ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ГЛУБОКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ УРОВНИ В TlFeSe₂

М.Р. ВАГАБОВА

*Бакинский Государственный Университет им. М.Э. Расулзаде
370145, Баку, ул. акад. З. Халилова, 23*

При изучении поляризованных $K_{\beta_{1,3}}$ спектров Fe в монокристаллах TlFeSe₂ установлен факт расщепления кристаллическим полем Fe 3p уровней.

Исследование крайне анизотропных слоистых и цепочечных кристаллов методом поляризованной рентген-эмиссионной спектроскопии дает более определенную и надежную информацию об электронной структуре твердых тел в сравнении с обычными рентгеновскими спектрами.

При изучении поляризационных рентгенэмиссионных спектров, обязанных переходам электронов с валентной на внутренние уровни слоистых кристаллов, была получена информация о распределениях электронных состояний различной симметрии в валентных зонах исследуемых соединений [1-3]. Результаты работ [4, 5] показали, что и глубокие остовные уровни испытывают сильное влияние кристаллического поля решетки, что приводит к их расщеплению.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований ориентационной зависимости параметров $K_{\beta_{1,3}}$ рентгеновской эмиссионной линии Fe в монокристалле TlFeSe₂. Резко анизотропная цепочечная структура монокристалла TlFeSe₂ (пространственная группа симметрии $C2/m$ [6]) делает его объектом, представляющим интерес с точки зрения изучения поляризационной зависимости рентгеновских эмиссионных спектров. Цель работы заключалась в определении влияния симметрии кристаллического поля решетки TlFeSe₂ на уровни энергии, лежащих вне пределов валентной зоны, ниже ее дна.

Fe $K_{\beta_{1,3}}$ линия обязана переходам с Fe3p уровней, расположенных на расстоянии 53 эВ от уровня Ферми, на Fe1s - уровень. Fe $K_{\beta_{1,3}}$ линия измерена в четвертом порядке отражения от кристалла кварца ($d=4,24 \text{ \AA}$, $R=2 \text{ м}$, энергетическое разрешение $\Delta E/E = 12000$) на флуоресцентном рентгеновском спектрометре с позиционно-чувствительным детектором ФРС КД-2. Устройство этого спектрометра подробно описано в [7]. Идея эксперимента основана на использовании поперечного характера электромагнитных колебаний и зависимости степени поляризации отраженного от кристалла-анализатора рентгеновского излучения от угла дифракции. Угол дифракции для Fe $K_{\beta_{1,3}}$ IV линии равен 56° , при этом степень поляризации исследуемого излучения составляла 75%. Fe $K_{\beta_{1,3}}$ линия была исследована нами в двух направлениях выхода излучения относительно оси \bar{c} монокристалла (параллельно и перпендикулярно) и поляризована, соответственно, перпендикулярно и параллельно оси \bar{c} . На рис. представлены результаты наших экспериментов. Fe $K_{\beta_{1,3}}$ спектр получен при ориентациях мо-

нокристалла ($\bar{c} \parallel \bar{J}$ и $\bar{c} \perp \bar{J}$ (кривые 1 и 2), \bar{J} -направление) на кристалл-анализатор.

Наблюдается смещение максимума интенсивности Fe $K_{\beta_{1,3}}$ линии при $\bar{c} \perp \bar{J}$ в длинноволновую сторону относительно ориентации $\bar{c} \parallel \bar{J}$ на 0,4 эВ, что втрое превышает

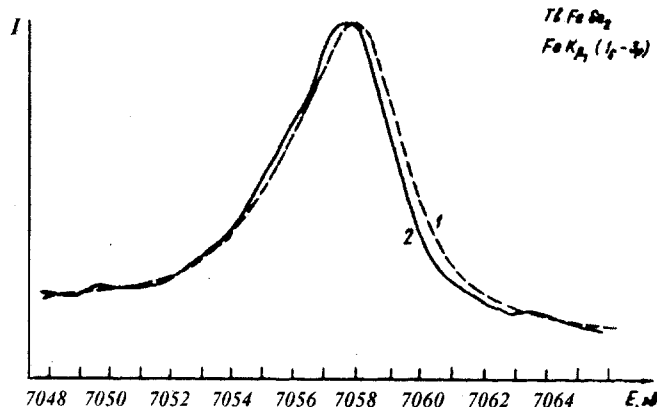


Рис. Fe $K_{\beta_{1,3}}$ рентгеновская эмиссионная полоса в монокристалле TlFeSe₂: 1 – при $\bar{c} \parallel \bar{J}$; 2 – при $\bar{c} \perp \bar{J}$.

шает ошибку эксперимента (0,13 эВ). Полуширина линии не изменяется. В таблице приведены параметры линии: спектральное положение и полуширина.

Таблица

Измеряемый параметр	Ориентированный монокристалл	
	$\bar{c} \parallel \bar{J}$	$\bar{c} \perp \bar{J}$
Спектральное положение максимума интенсивности (эВ)	7058±0,13	7057,6±0,13
Полуширина (эВ)	5±0,13	5±0,13

Полученные результаты можно качественно объяснить, если предположить, что кристаллическое поле вызывает расщепление 3p уровней Fe на x, y, z компоненты (ось \bar{z} считаем параллельной \bar{c}). При ориентации монокристалла $\bar{c} \perp \bar{J}$ регистрируется излучение с вектором поляризации $\bar{e} \parallel \bar{c}$, переход $3p \rightarrow 1s$, при $\bar{c} \parallel \bar{J}$ - $\bar{e} \perp \bar{c}$; переход $3p_{xy} \rightarrow 1s$.

В нашем эксперименте к I_z компоненте излучения добавляется 12% $I_x (I_y)$ компоненты (за счет неполной поляризации), а в случае $\bar{c} \parallel \bar{J}$ к I_x компоненте добавляется 12% I_y -компоненты. Так как полуширина линии не

изменяется, то можно считать, что вес отдельных компонент излучения (I_x, I_y, I_z) одинаков.

Наблюдаемое нами расщепление Fe3p уровней, свидетельствующее о влиянии кристаллического поля ре-

шетки на эти уровни, указывает на то, что связи электронов вдоль оси \bar{C} значительно сильнее, что и приводит к большей энергии связи Fe3p_z-электронов.

- [1] И.Б. Боровский, В.И. Матышкин, В.И. Нефедов. ДАН СССР, 1970, т. 195, 5.
- [2] И.Б. Боровский, П.Н. Семочкин, М.Р. Рзаева. Физ. мет. и металловедение, 1975, т. 40, в.3, с.537.
- [3] М.Р. Вагабова. Деп. 07.06. № 90, Аз-Д83.
- [4] О. Брюммер и Г. Дреггер. «Рентгеновские спектры и электронная структура вещества», 1969, ИМФ АН УССР, т.1, Киев.

- [5] М.М.Бабаев, М.Р. Вагабова, Э.З. Курмаев, В.М. Черкашенко, Г.Д. Гусейнов. Деп. 14.01.88, №934, Аз-Д88.
- [6] A.Kutoglu. Naturwissenschaften, В 61, 1974, №3, p. 125.
- [7] В.Е.Долгих, В.М. Черкашенко, Э.З. Курмаев, Д.А. Гоганов, Е.К. Овчинников, Ю.М. Ярмошенко, Т.П. Топаркова. ПТЭ, 1985, №1.

M.R. Vahabova

TIFeSe₂ MONOKRİSTALINDA KRİSTAL SAHƏNİN SİMMETRİYASININ DAXİLİ ELEKTRON SƏVİYYƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

TIFeSe₂ monokristalında polyarlaşmış Fe $K_{\beta_{1,3}}$ rentgen emissiya spektrlərinin öyrənilməsi zamanı kristal sahənin təsiri nəticəsində Fe 3p səviyyələrinin parçalanması faktı müəyyən olunmuşdur.

M.R. Vagabova

INFLUENCE OF THE CRYSTALLINE FIELD SYMMETRY ON THE DEEP ELECTRON LEVELS IN TIFeSe₂.

At the study of the polarized $K_{\beta_{1,3}}$ spectra of Fe in monocrystals TIFeSe₂ it is established that Fe 3p levels split by the crystalline field action.