

ценции (≈ 0.3 эВ), с усилением электрон-фононного взаимодействия в процессе энергетической релаксации электронов или нет, требует отдельного и в том числе количественного исследования электрон-фононного взаимодействия в металлическом золоте.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Mooradian A. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. N 5. P. 185—187.
- [2] Boyd G. T., Yu Z. H., Shen Y. R. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 12. P. 2923—2936.
- [3] Apell P., Monreal R., Lungvist. // Physica Scripta. 1988. V. 38. N 2. P. 174—179.
- [4] Plekhanov V. G. // Proc. Int. Conf. Nonlinear Optics, NLO'88, Dublin, 1988. P. 66—72.
- [5] Плеханов В. Г. // Квант. электр. 1989. Т. 16. № 10. С. 2156—2159.
- [6] Силукова Т. Н. // Автореф. канд. дис. Свердловск, 1979.

НПО «Дезинтегратор»
Таллинн

Поступило в Редакцию
5 февраля 1990 г.

УДК 535.323

© Физика твердого тела, том 32, № 7, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 7, 1990

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АМОРФНОГО Fe-B

В. С. Степанюк, А. В. Козлов, А. А. Кацнельсон, О. В. Фарберович

В последнее время большой интерес проявляется к расчетам неидеальных систем, в частности аморфных соединений металл—металлоид. В предыдущей работе [1] мы сообщали о расчете электронной структуры атома фосфора в различном окружении атомами никеля. Оказалось, что многие особенности, связанные с электронными состояниями фосфора, почти не зависят от окружения, для других установлены вполне определенные тенденции. В этой работе приводятся результаты расчета электронной структуры бора в железе.

Расчеты электронной структуры аморфного Fe—B проводились ранее ЛМТО—ПАС методом [2], на основе метода сильной связи [3], на основе метода ЛКАО [4]. В этих работах основное внимание уделялось состояниям, связанными с атомами железа. Показано, что аморфизация железа должна приводить к исчезновению расщепления d -пика. Обнаружено отсутствие сильного перетекания электронного заряда от атомов бора к атомам железа. В нашей работе акцент сделан на рассмотрении роли бора в этой системе.

Методика расчета подробно изложена в [1]. Вначале самосогласованным методом ЛППВ (линейный метод присоединенных плоских волн) рассчитывалась электронная структура идеального кристалла Fe в различных кристаллических модификациях (ГЦК, ОЦК, ПК). Расстояние между ближайшими соседями для всех структур принималось таким же, как и в ОЦК Fe, и равным 2.482 \AA (модель «жестких шаров»). Результирующая плотность состояний парамагнитного железа показана на рис. 1. Четко проявляется структура, связанная с d -состояниями. Затем методом MTGN (muffin-tin Green-function) [5, 6] определялась электронная структура примеси. Плотность электронных состояний точечной примеси замещения B в Fe показана на рис. 2. Гибридизация d -состояний железа с p -состояниями бора усиливается в ряду ГЦК—ОЦК—ПК, s -состояния бора вносят существенный вклад только вблизи дна зоны проводимости и слабо зависят от окружения. В фотоэмиссионных спектрах эти состояния проявляются в районе -9 и -6 эВ [7, 8]. Как и в случае

примеси Р в Ni, выше уровня Ферми существуют антисвязывающие p -состояния, однако в Ni—Р они находятся ближе к уровню Ферми. Перетекание заряда происходит от атома Fe к атому В и равно 0.31, 0.30 и 0.35 заряда электрона для ГЦК, ОЦК и ПК структур соответ-

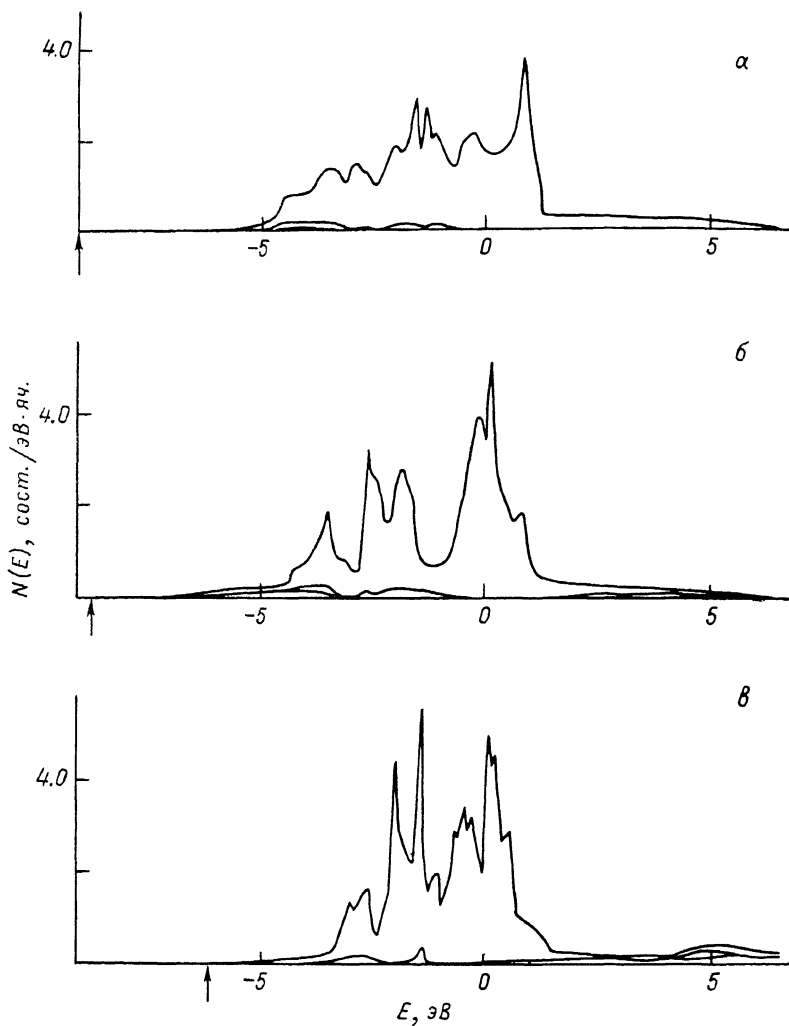


Рис. 1. Локальная плотность состояний кристаллического железа с ГЦК (а), ОЦК (б), ПК (в) структурой.

Кривые соответствуют парциальным вкладам s , $s+p$, $s+p+d$. Стрелкой показано положение МТ-нуля.

ственно. Это находится в резком контрасте с моделью жестких зон, в которой бор должен отдавать электроны. Неприменимость этой модели к аморфным соединениям металл—металлоид была показана и ранее [2, 9].

Таким образом, в электронной системе Fe—В имеются сходные с Ni—Р особенности: образование локализованных состояний вблизи дна зоны проводимости, образование антисвязывающих p -состояний выше уровня Ферми, гибридизация состояний металлоида с d -состояниями металла, уровень Ферми в обеих системах находится вблизи минимума в плотности электронных состояний металлоида. Как в той, так и в другой системах изменение локальной симметрии не приводит к существенным изменениям электронной структуры.

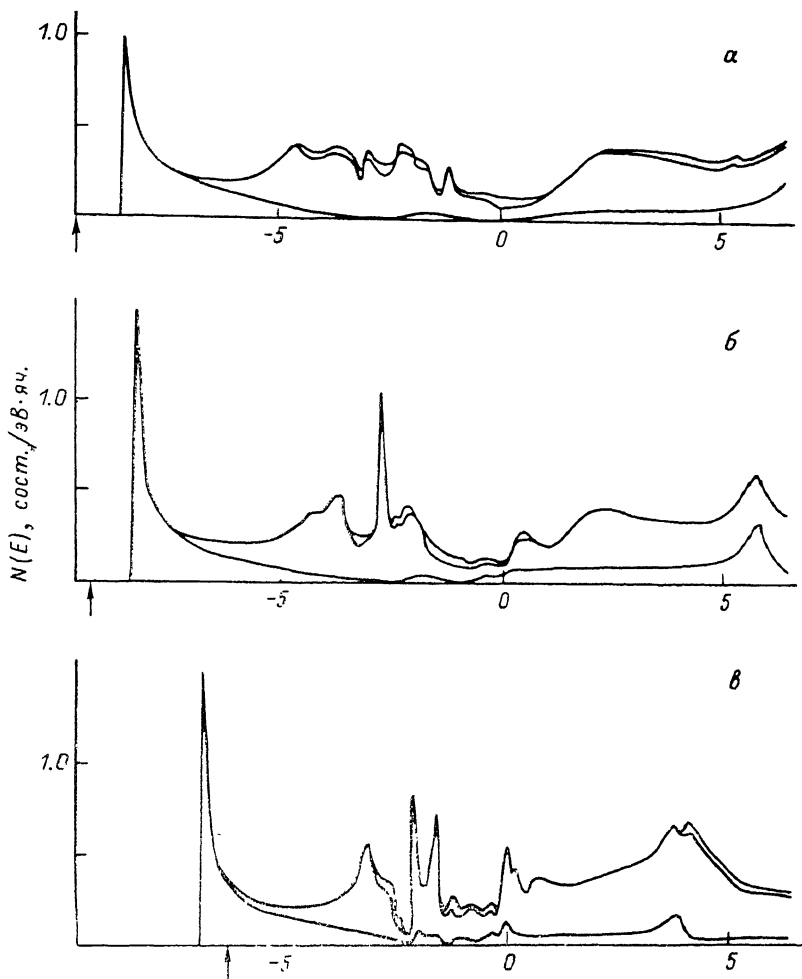


Рис. 2. Локальная плотность состояний точечной примеси бора в кристаллическом железе с ГЦК (а), ОЦК (б), ПК (в) структурой.
Обозначения те же, что и на рис. 1.

Список литературы

- [1] Степанюк В. С., Козлов А. В., Кацнельсон А. А., Фарберович О. В., Сас А., Койнок И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 1. С. 147—150.
- [2] Fujiwara T. // J. Phys. F. 1982. V. 12. N 4. P. 661—676.
- [3] Ostermeier H., Krey U. // Materials Science and Engineering. 1988. V. 99. P. 273—275.
- [4] Varga S., Krempasky J. // J. Phys.: Condens. Mater. 1989. V. 1. N 42. P. 7851—7850.
- [5] Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. N 25. P. 1713—1716.
- [6] Podloucky R., Zeller R., Dederichs P. H. // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. N 12. P. 5777—5790.
- [7] Amamou A., Krill G. // Sol. St. Comm. 1980. V. 23. N 10. P. 1087—1090.
- [8] Paul Th., Neddrmeier H. // J. Phys. F. 1985. V. 15. N 1. P. 79—89.
- [9] Khanna S. N., Ibrahim A. K., McKnight S. W., Bansil A. // Sol. St. Comm. 1985. V. 55. N 3. P. 223—226.