

ности в спектрах, которые отнесены к проявлению интерфейсной моды и эффектов размерного квантования (сложения колебательных зон).

Список литературы

- [1] Santos P. V., Ley L. // Superlattices and microstruct. 1989. V. 5. N 1. P. 43—50.
- [2] Persons P. D., Ruppert A. F., Abeles B., Tiedje T. // Phys. Rev. 1985. V. 32B. N 8. P. 5558—5560.
- [3] Santos P. V., Ley L. // Phys. Rev. 1987. V. 36B. N 6. P. 3325—3335.
- [4] Крюков С. А., Плотников А. Ф., Пудонин Ф. А., Стопачинский В. Б. // Кр. сообщ. по физике. 1986. № 5. С. 34—37.
- [5] Плотников А. Ф., Пудонин Ф. А., Стопачинский В. Б. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 11. С. 443—444.
- [6] Виноградов Е. А., Макаров Г. И. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 10. С. 111—114.
- [7] Гончаров А. Ф., Денисов В. Н., Маврин Б. Н., Подобедов В. Б. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 11. С. 321—327.
- [8] Vardeny Z., Brafman O. // Phys. Rev. 1979. V. 19B. N 6. P. 3290—3298.
- [9] Beeman D., Tsu R., Thorpe M. F. // Phys. Rev. 1985. V. 32B. N 2. P. 874—878.
- [10] Schubert M. B., Schumm G., Lotter E., Bauer G. H. // Proc. IX Int. Symp. Plasma Chem. 1989. V. 3. P. 1389—1393.
- [11] Bacsa W., Ospelt M., Henz J., von Kanel H., Wachter P. // Helv. Phys. Acta. 1989. V. 62. N 6—7. P. 776—777.
- [12] Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. М., 1966. С. 155—159.

Институт спектроскопии АН СССР
Троицк

Поступило в Редакцию
2 февраля 1990 г.

УДК 535.37 : 548.0 : 573.35

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

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ПРОЯВЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ d -ЗОН В СПЕКТРАХ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЗОЛОТА

В. Г. Плеханов, Т. Н. Силукова

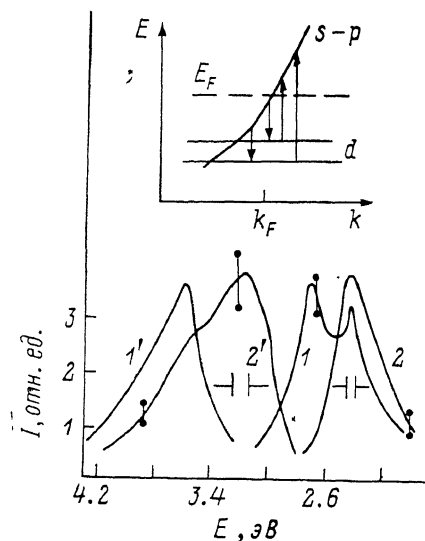
Несмотря на то что с момента первого наблюдения Мурадяном [1] фотолюминесценции металлов (золото, медь и т. д.) прошло более двух десятилетий, задача исследования зонной структуры металлов оптическими методами до настоящего времени остается актуальной, о чем свидетельствует, в частности, обильная литература (см., например, [2, 3]). И дело здесь, по-видимому, не только в большом прикладном аспекте этой задачи, который в первую очередь связан с разработкой и применением люминесцентного метода в качестве метода неразрушающего контроля (в том числе, например, при изучении микромеханизмов разрушения металлов и металлических конструкций). Актуальной остается задача изучения механизма генерации второй гармоники лазерного излучения от металлов.

Настоящее сообщение, являясь логическим развитием результатов работ [1–3], посвящено исследованию зонной структуры металлического золота методом низкотемпературной люминесценции. При этом обнаруженная структура как в спектрах собственной люминесценции, так и ее спектрах возбуждения однозначно свидетельствует о проявлении структуры верхней валентной d -зоны золота.

Используемая аппаратура, на которой осуществлены эксперименты, неоднократно описывалась ранее (см., например, [4, 5]). Отметим только, что низкое значение квантового выхода люминесценции металлов (по оценке авторов работы [3], $\eta \simeq 10^{-10}$) предъявляет высокие требования к чувствительности экспериментальной установки. Последнее в настоящее время относительно легко реализуется при использовании системы

счета фотонов. Объектами исследования служили пластинки металлического золота марки о. ч. квалификаций А2 (содержание Au 99.99 %) и А4 (99.9999 %) (подробнее см. [6]). Приводимые в работе результаты относятся к последним образцам, хотя аналогичные спектры получены и на образцах квалификации А2.

Типичные спектры люминесценции металлического золота при фото-возбуждении в глубине фундаментального поглощения представлены на рисунке. При длинноволновом возбуждении ($E_{\text{возб}}=3.17$ эВ) наблюдаемое в широком интервале температур ($2 \leq T \leq 150$ К) излучение (кривая 2) находится в хорошем согласии с результатами [1] при более длинноволновом и лазерном ($\lambda=488$ нм) возбуждении. Однако при возбуждении более высокоэнергетическими фотонами спектр люминесценции претерпевает (кривая 1) существенные изменения. В первую очередь это относится к появлению еще одной полосы излучения с максимумом при 2.72 эВ, а также заметному сужению полосы с $E_m=2.43$ эВ. Отметим неизменность максимума полос люминесценции в зависимости от энергии



претерпевает (кривая 1) существенные изменения. В первую очередь это относится к появлению еще одной полосы излучения с максимумом при 2.72 эВ, а также заметному сужению полосы с $E_m=2.43$ эВ. Отметим неизменность максимума полос люминесценции в зависимости от энергии

Спектр собственной люминесценции металлического золота при 4.2 К и при возбуждении фотонами с энергией 3.59 (1) и 3.17 эВ (2). Спектр возбуждения люминесценции при 4.2 К для полос излучения с $E_m=2.72$ (1') и 2.43 эВ (2').

Указано спектральное разрешение монохроматора, выделяющего люминесценцию, и «возбуждающего» монохроматора.

возбуждающих фотонов. Это явно свидетельствует в пользу того, что природа этих полос действительно обусловлена термализованным излучением. Впервые измеренные в настоящей работе спектры возбуждения наблюдаемых полос излучения также показаны на рисунке. Если длинноволновое излучение возбуждается приблизительно с одинаковой эффективностью в обеих полосах возбуждения ($E_m=3.17$ и 3.59 эВ), то коротковолновое излучение возбуждается в основном только в коротковолновой полосе. Наблюдаемая величина расщепления в спектре возбуждения составляет ≈ 0.4 эВ, тогда как в спектре люминесценции ≈ 0.3 эВ.

Схематическая картина, согласно [1, 3], процесса возбуждения и люминесценции для благородных металлов (в том числе золота) показана на вставке рисунка, где зонная структура состоит из s-p-зоны проводимости и d-валентных зон. Очевидно, что перекрытие этих зон незначительно, о чем свидетельствует и заметный стоковый сдвиг наблюдаемой люминесценции. При возбуждении электроны переводятся из d-зон на состояния, лежащие выше уровня Ферми. Большая полуширина наблюдаемых полос люминесценции в первую очередь, по-видимому, вызвана плоским характером валентных d-зон в области k-пространства для $k \leq k_F$ [1, 3], где k_F — квазиимпульс электронов с энергией Ферми. Вторая причина уширения может быть вызвана сильным электрон-фононным взаимодействием. Наличие коротковолновой полосы, предсказанное уже в [1], связано с участием в процессе люминесценции также состояний нижележащей d-валентной зоны. Найденная величина расщепления в спектре возбуждения 0.4 эВ практически точно совпадает (учитывая относительно невысокое спектральное разрешение; см. выше) с величиной расщепления d-зон золота, 0.45 эВ, полученной в работе [2]. Связано ли уменьшение величины расщепления, наблюдаемое в спектрах люминес-

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 -шпа. 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