

Итак, результаты данной работы свидетельствуют о том, что термоциклирование с $T_{\min} = 77$ К или даже однократное охлаждение до 20 К генерирует в TlGaSe_2 долгоживущие метастабильные состояния, наличие которых приводит, в частности, к «стиранию» ФП при $T \sim 250$ К. Природа таких состояний, по-видимому, связана с разупорядочением структуры, главным образом с нарушением периодичности упаковки слоев пакетов вдоль оси c .

Список литературы

- [1] Алиев Р. А., Аллахвердиев К. Р., Баранов А. И. и др. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 5. С. 1271—1276.
- [2] Allahverdiev K. R., Aldaganov M. A., Mamedov T. G., Salaev E. Yu. // Sol. State. Comm. 1986. V. 58. P. 295—297.
- [3] Волков А. А., Гончаров Ю. Г., Козлов Г. В., Сардарлы Р. М. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 7. С. 293—295.
- [4] Мамедов Н. Т., Крупников Е. С., Панич А. М. // ФТТ. 1989. Т. 39. № 1. С. 290—292.
- [5] Гололобов Ю. П., Шило С. А., Юрченко И. А. // УФЖ. 1990. Т. 35. № 11. С. 1721—1724.
- [6] Алиев В. А. // Кристаллография. 1990. Т. 35. № 2. С. 506—507.
- [7] Bortchagovski E. G., Lozovski V. Z., Shilo S. A., Yurchenko I. A. // Physica (C). Superconductivity. 1990. V. 165. P. 308—314.
- [8] Беляев А. Д., Байса Д. Ф., Бондарь А. В. и др. // УФЖ. 1975. Т. 20. № 10. С. 1744—1746.
- [9] Струков Б. А. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1987. Т. 51. № 10. С. 1717—1725.
- [10] Крупников Е. С., Алиев Ф. Ю., Мамедов Н. Т. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1989. Т. 25. № 11. С. 1866—1868.
- [11] Волков А. А., Гончаров Ю. Г., Козлов Г. В. и др. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3621—3628.
- [12] Алиев А. К., Бахышов Н. А., Бахышов А. Э., Гаджиев М. С. // Изв. вузов, сер. физ. 1989. № 12. С. 84—86.
- [13] Жигаadlo Н. Д., Зарецкий В. В. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49. № 9. С. 498—500.

Институт полупроводников АН Украины
Киев

Поступило в Редакцию
18 декабря 1990 г.
В окончательной редакции
17 апреля 1991 г.

УДК 539.2

© Физика твердого тела, том 33, № 9, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 9, 1991

ВЫЗВАННЫЕ ВОДОРОДОМ СВОБОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЗОНЕ ПРОВОДИМОСТИ PdH : АНАЛИЗ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

А. В. Солдатов, Т. С. Иванченко, А. Бианкони

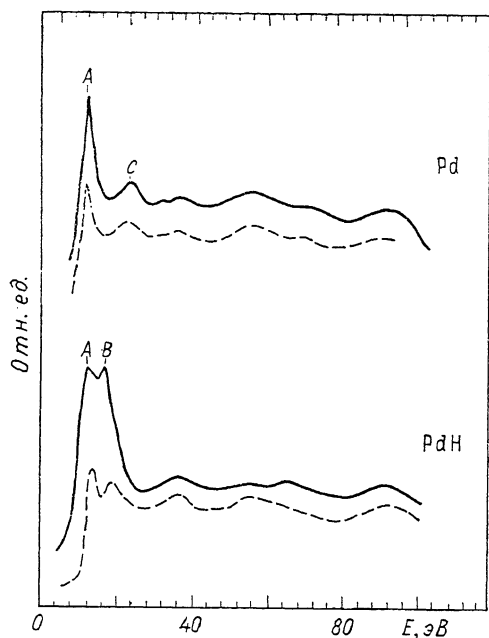
Электронная структура гидридов металлов, в частности палладия, интенсивно изучается последнее десятилетие [1]. На основании многочисленных зонных расчетов (например, [2]) и данных рентгеновской фотоэмиссии [3] были исследованы особенности формирования валентной зоны системы PdH_x . Оказалось, что при проникновении водорода в металлический палладий в области около 5 эВ ниже уровня Ферми появляются гибридные связывающие $\text{Pd}-\text{H}$ состояния.

В то же время свободные состояния в зоне проводимости изучены значительно слабее. В оптических спектрах [4] была обнаружена особенность в районе ~ 4 эВ выше уровня Ферми. Однако до появления метода анализа ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения (БТСРП, международный термин XANES) [5] не существовало удобного

инструмента для исследования распределения свободных состояний определенной симметрии.

Рентгеновские L -спектры поглощения палладия были получены в синхронном центре г. Фраскати (Италия) в условиях, аналогичных описанным в [6]. Алгоритм расчета методом полного многократного рассеяния приведен в [7], причем следует отметить, что до настоящего времени расчеты БТСРП L -серии в соединениях методом полного многократного рассеяния практически отсутствуют [5].

Поэтому приведем основные параметры расчета. Кристаллическая решетка ГЦК с параметром $a=3.890 \text{ \AA}$ (Pd) и NaCl с $a=4.090 \text{ \AA}$ (PdH). Кристаллический потенциал строился в muffin-tin виде с обменным параметром $\alpha=1.0$ из атомных плотностей, рассчитанных самосогласованным методом Дирака—Слейтера. Кластеры для металлического палладия содержат до 4 сфер (полное число атомов 55), а для случая PdH — 6 сфер (число атомов 81). Для непосредственного сопоставления результатов расчета с экспериментом мы учитывали распределение Ферми и уширение экспериментального спектра за счет конечного времени жизни основной дырки ($\Gamma=2.1 \text{ эВ}$ [8]), длины свободного пробега фотоэлектрона (функция из [8]) и аппаратной функции (разрешение 1.2 эВ).



Совмещенные теоретические (сплошные линии) и экспериментальные (штриховые линии) БТСРП L_3 края Pd в металлическом палладии и PdH.

Масштаб шкалы энергий для спектров металла (сверху) отличается от шкалы для PdH.

На рисунке приведены совмещенные в единой шкале теоретические и экспериментальные спектры рентгеновского поглощения в металлическом палладии и PdH. Чтобы не принимать во внимание различия в спектрах, связанных с разницей в параметрах решетки, мы в соответствии с правилом « $1/R^2$ » [5] провели масштабирование спектра металла с множителем, равным отношению квадратов параметров решетки в металле и в гидриде (0.904).

Хорошее согласие расчетных результатов с экспериментом (отметим, что наши экспериментальные данные близки к полученным в [6]) позволяет сделать вывод о реалистичности использованных в расчете подходов и о правомерности применения результатов расчета к анализу экспериментальных L -спектров поглощения. (В частности, подтвержден вывод о малости влияния многоэлектронных возбуждений на L_3 -спектры палладия [9]). После масштабирования энергетической шкалы спектра металлического палладия единственным, но существенным отличием спектра в гидриде являются исчезновение максимума C и появление резкого пика B . Причиной этих изменений в БТСРП Pd являются процессы многократного рассеяния фотоэлектрона при обязательном участии атомов водорода («a priori» — это не очевидно из-за того, что атомы водорода являются слабо рассеивающими центрами).

Чтобы проверить, не есть ли отмеченные выше изменения в БТСРП следствием простого увеличения межатомных расстояний Pd—Pd при

переходе к PdH, мы провели расчет модельного кластера. В нем (с полным сохранением симметрии) атомы палладия находились в тех же позициях, что и в PdH, а водородная подрешетка отсутствовала. БТСРП, рассчитанная в таком кластере, оказалась точной копией БТСРП металлического Pd с измененным (в 0.904 раза в полном соответствии с правилом «1/R²») масштабом энергетической шкалы. И только при «включении» в расчет подрешетки атомов водорода (хотя бы одной сферы) происходит исчезновение максимума *C* и одновременное появление вблизи основного пика максимума *B*.

На языке квантовой химии можно сказать, что в зоне проводимости PdH происходит перераспределение плотности состояний палладия (уменьшение в области 19 эВ), а в области выше дна зоны на ≈ 10 эВ появляются гибридные состояния атомов Pd и H. Присутствие обнаруженных ранее [2, 3] связывающих гибридных Pd—H состояний ниже уровня Ферми в PdH согласуется с представлениями о несвязующем характере выявленных нами незаполненных электронных состояний в зоне проводимости PdH.

Список литературы

- [1] Свитендик А. Водород в металлах. М.: Мир, 1981. 436 с.
- [2] Papaconstantopoulos D. A., Klein D. M., Faulkner J. S., Boyer L. L. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 6. P. 2784—2791.
- [3] Eastman D. E., Cashion J. K., Switendick A. C. // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 21. N 1. P. 35—38.
- [4] Frazier G. A., Glosser R. // Solid State Commun. 1982. V. 41. N 3. P. 245—250.
- [5] Bianconi A. // X-Ray Absorption. N. Y.: J. Wiley and Sons., 1988.
- [6] Davoli I., Marcelli A., Fartunato J. et al. // Solid State Commun. 1989. V. 71. N 5. P. 383—390.
- [7] Vvedensky D. D., Saldin D. K., Pendery J. B. // Comput. Phys. Commun. 1986. V. 40. P. 421—440.
- [8] Muller J. E., Jepsen O., Wilkins J. W. // Solid State Commun. 1982. V. 4. N 5. P. 365—368.
- [9] Benfatto M., Bianconi A., Davoli I. et al. // Solid State Commun. 1983. V. 46. N 5. P. 367—370.

Ростовский государственный университет
Ростов-на-Дону

Поступило в Редакцию
10 декабря 1990 г.
В окончательной редакции
18 апреля 1991 г.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭФФЕКТ ФАРАДЕЯ В ОРТОФЕРРИТЕ YFeO₃

М. В. Четкин, А. В. Кирюшин, Ю. И. Шербаков

Для выяснения природы эффекта Фарадея (ЭФ) в редкоземельных ортоферритах представляет интерес проведение экспериментов по исследованию полевых зависимостей эффекта. В работе [1] исследована полевая зависимость ЭФ на длине волны $\lambda = 0.63$ мкм в пластине YFeO₃, вырезанной перпендикулярно оптической оси, при различных ориентациях магнитного поля **H** в плоскости *bc*. Было показано, что изменение ЭФ определяется проекцией **H** на направление света. В работах [2, 3] эти исследования были проведены при $\lambda = 0.63$ мкм и различных ориентациях направления распространения света **k** и **H** в плоскости *ac*. Полученные результаты были связаны с существованием ферро-, антиферро- и диамагнитного вкладов в ЭФ в ортоферритах.