

Пространственная зависимость дихроизма фотоэмиссии $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$ при возбуждении циркулярно поляризованным излучением

© Ю.М. Яρμοшенко, Т.В. Кузнецова, А.В. Постников*, А.Н. Титов, С.Г. Титова**,
В.В. Федоренко, P. Vilmercati***, A. Goldoni***, R. Claessen****

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

* Paul Verlaine University–Institute de Physique Electronique et Chimie, Laboratoire de Physique des Milieux Denses,
F-57078 Metz, France

** Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016 Екатеринбург, Россия

*** Elettra Synchrotron Light Source,
34012 Basovizza, Trieste, Italy,

**** Experimentalphysik II, Universität Augsburg,
D-86135 Augsburg, Germany

E-mail: yarmoshenko@ifmlrs.uran.ru

(Поступила в Редакцию 10 октября 2007 г.
В окончательной редакции 20 марта 2008 г.)

Представлены результаты экспериментального исследования угловой зависимости фотоэмиссии (angle-resolved photoelectron spectroscopy — ARPES) валентной полосы монокристалла $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$ при возбуждении циркулярно поляризованным излучением. Изучена ARPES в окрестности точки Γ зоны Бриллюэна в двух наиболее симметричных направлениях ГК и ГМ. Использована некопланарная геометрия съемки. Наблюдается круговой дихроизм угловой зависимости фотоэмиссии (circular dichroism in the photoemission angular distribution — CDAD) во всем энергетическом и угловом диапазоне. Его величина зависит от выбора полосы, энергии связи, полярного угла и изменяется от 0 в Γ до 20%.

Работа выполнена в рамках проекта № 2004105 на синхротроне ELETTRA в Триесте при поддержке программы Минобрнауки РФ „Развитие научного потенциала высшей школы“ (РНП 2.1.1.6945) и гранта РФФИ № 06-03-32900.

PACS: 73.20.At, 79.60.-i

1. Введение

Интеркалатные соединения дихалькогенидов титана образуются внедрением различных объектов в пространство между слоями решетки-матрицы TiX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$). Если таким объектом оказывается атом $3d$ -металла, его валентные электроны спин-поляризованы [1]. Поскольку взаимодействие возбуждающего излучения с электронами зависит от ориентации спина валентной оболочки, при магнитном упорядочении существует возможность экспериментального определения спиновых подзон из фотоэмиссионных спектров. Этого можно достичь при использовании кругополяризованного излучения с противоположным направлением поляризации для возбуждения фотоэмиссии. Кроме спиновой поляризации существуют другие причины влияния круговой поляризации возбуждающего излучения на формирование спектров фотоэмиссии, например частичная утрата элементов пространственной симметрии из-за существования поверхности и конечной глубины выхода электронов. Настоящая работа посвящена изучению влияния такого рода причин, не связанных с магнитным и/или спиновым состоянием атомов. С этой целью изучено интеркалатное соединение $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$, в котором отсутствует магнитное (по крайней мере до температу-

ры 50 К [2]) и структурное упорядочение железа, что могло бы привести к реконструкции зоны Бриллюэна исходной решетки TiTe_2 . В то же время состояния Fe спин-поляризованы [1,3]. Таким образом, этот материал удобен для изучения возможных причин дихроизма, не связанных со спиновой поляризацией электронов.

2. Эксперимент

Монокристаллы Fe_xTiTe_2 выращены методом газотранспортных реакций с использованием I_2 в качестве газа-носителя. Методика выращивания совпадает с использованной для выращивания кристаллов M_xTiSe_2 [4]. Химический состав кристаллов, определенный методом микронзондового анализа на микроскопе (JEOL-733) и по величине параметров решетки [2], соответствует формуле $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$.

Экспериментальные исследования угловой зависимости фотоэмиссии (ARPES) монокристалла $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$ выполнены на синхротроне ELETTRA в Триесте. Спектры получены с использованием спектрометра углового разрешения SCIENTA 50 при температуре около 50 К. Энергия возбуждения составляла 21.5 eV. Энергетическое разрешение — 30 meV, размеры сечения пучка — $5 \times 20 \mu\text{m}$. Эксперимент проведен при возбуждении

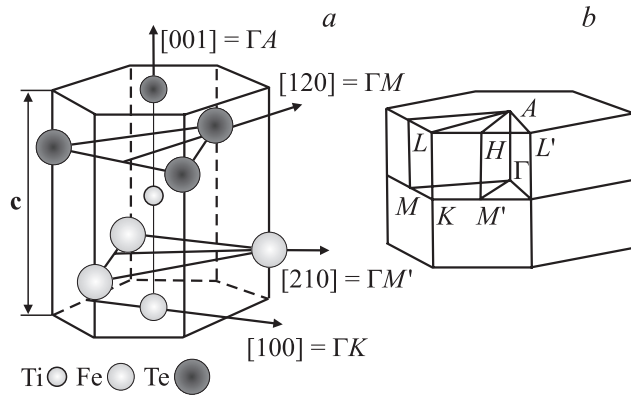


Рис. 1. Фрагмент кристалла $Fe_{1/4}TiTe_2$ (a) и зона Бриллюэна соединения $1T-TiTe_2$ (b). Направление ΓA в зоне Бриллюэна соответствует направлению оси c , перпендикулярной базисной плоскости кристалла в прямом пространстве (направление $[001]$).

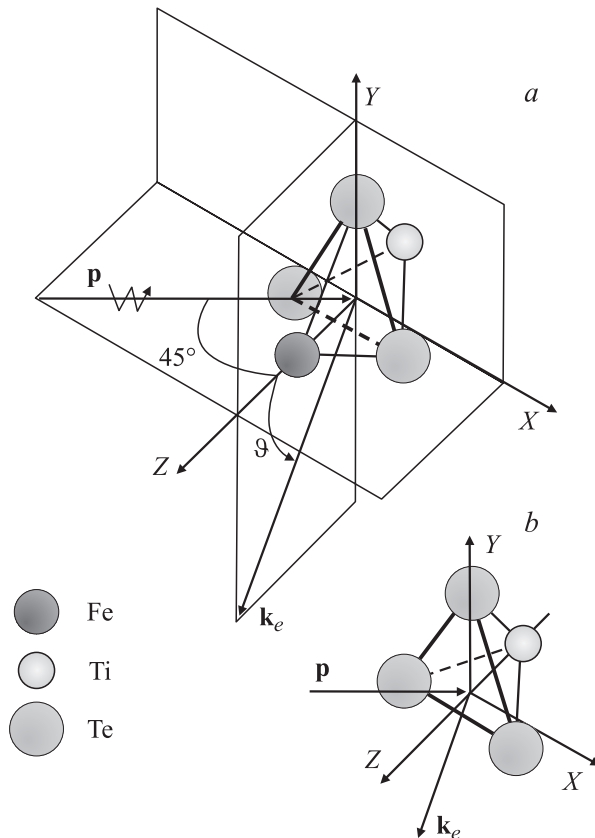


Рис. 2. Схема проведения эксперимента: \mathbf{p} — импульс фотона, \mathbf{k}_e — импульс фотоэлектрона, ϑ — полярный угол. При регистрации фотоэлектронов полярный угол изменяется в плоскости ZY . Координатная ось Z совпадает с направлением кристаллографической оси $[001]$ и проходит через атомы титана, железа и центр полиэдра. Показаны сопряженные основаниями пирамиды $TiTe_3Fe$ (a) и пирамиды $TiTe_3$ (b) на поверхности монокристаллического образца (подробнее см. в тексте).

циркулярно поляризованным излучением. Образцы были механически расколоты непосредственно в рабочем объеме спектрометра (10^{-9} Torr). Ориентация образцов выполнена в камере подготовки методом дифракции медленных электронов.

На рис. 1 показаны основные фрагменты кристаллической структуры соединения $Fe_{1/4}TiTe_2$ и зона Бриллюэна, на рис. 2 — схема проведения эксперимента. Указано взаимное соответствие наиболее симметричных элементов структуры в прямом и обратном пространстве. Пучок циркулярно поляризованных фотонов находится в горизонтальной плоскости XZ и направлен к поверхности монокристалла, которая совпадает с кристаллографической плоскостью (001) , под постоянным углом 45° . При регистрации фотоэлектронов изменение полярного угла ϑ происходит в вертикальной плоскости YZ , перпендикулярной поверхности монокристалла.

В соответствии с принципом Неймана дихроизм в качестве физического свойства кристалла должен включать элементы симметрии точечной группы кристалла и волнового вектора валентного электрона. Поэтому анализ поведения дихроизма в нашей схеме проведения эксперимента требует подробного учета элементов симметрии кристалла, особенно важную роль играют плоскости отражения. В $Fe_{1/4}TiTe_2$ (соединение типа CdI_2) имеются центр инверсии, два семейства кристаллических плоскостей скольжения $\{001\}$, $\{100\}$ и одно семейство плоскостей зеркального отражения $\{120\}$. Они перпендикулярны соответствующим направлениям $[001]$, $[100]$ и $[120]$ кристалла (рис. 1). Эти элементы симметрии исходной матрицы $1T-TiTe_2$ унаследованы интеркалированным соединением $Fe_{1/4}TiTe_2$.

3. Результаты

Особенность ARPES для $2H$ - и $1T$ -политипов слоистых дихалькогенидов переходных металлов, на которую впервые обратили внимание авторы [5], заключается в резком различии интенсивности выхода электронов в полностью эквивалентных с точки зрения химической связи направлениях ΓM и $\Gamma M'$ зоны Бриллюэна для $1T$ -структуры по сравнению со структурой $2H$. Такой эффект первоначально объясняли понижением симметрии вращения вокруг гексагональной оси c до третьего порядка по сравнению с шестым порядком для $2H$ -политипа и эффектом тени [5]. В работе [6], посвященной расчетам дихроизма фотоэмиссии в TaS_2 , подчеркивается, что учет этого эффекта недостаточен для объяснения экспериментальных результатов. По приблизительным оценкам, сделанным в [5], полная глубина выхода составляла не более 13 \AA (при энергии возбуждения 10.2 eV). По современным данным эти оценки не соответствуют реальности. При энергии возбуждения 20 eV путь свободного пробега в подобной матрице, содержащей элементы переходных периодов, не превышает 4 \AA [7]. Аналогичное поведение наблюда-

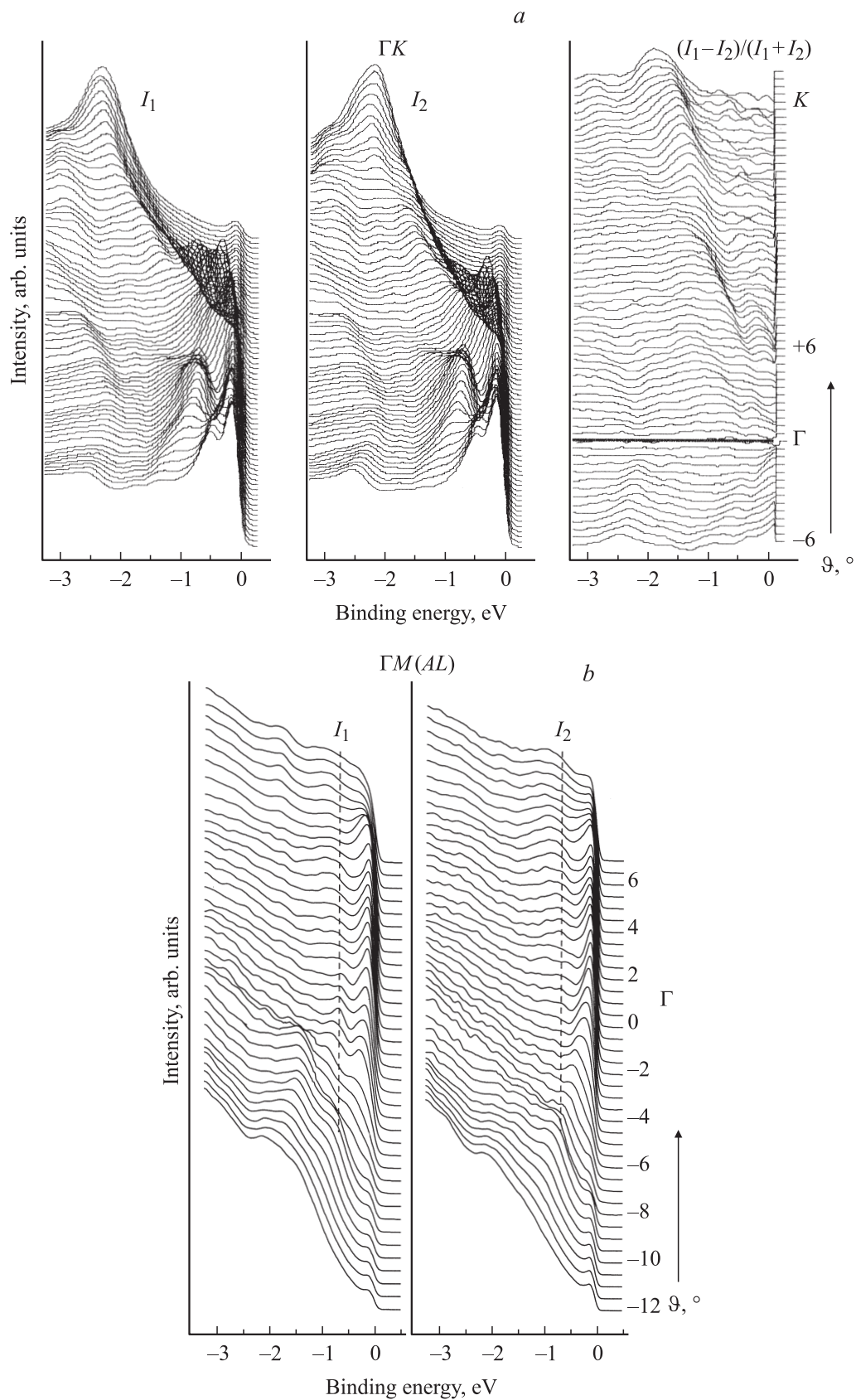


Рис. 3. *a)* Угловая зависимость спектров фотоэмиссии в направлении ΓK при возбуждении лево- (I_1) и правонаправленным (I_2) циркулярно поляризованным излучением в зависимости от энергии связи. Справа показано угловое распределение дихроизма. В точке Γ полярный угол $\vartheta = 0$. *b)* Угловая зависимость спектров фотоэмиссии в направлении $\Gamma M(AL)$. Штриховой линией показана полоса с энергией связи 0.7 eV, имеющая слабо выраженную дисперсию.

ется для $1T-TiTe_2$ и интеркалированного $Sr_{1/3}TiTe_2$ [8]. Подтверждением такой точки зрения являются результаты работ [9,10], в которых упорядочение $3d$ -атомов интеркаланта в объеме кристалла по данным ARPES не приводит к соответствующей реконструкции зоны Бриллюэна. При подготовке образцов для измерений скол происходит по кристаллографической плоскости, содержащей интеркалированные атомы. На готовой для измерений поверхности остается половина этих атомов в статистически равноправном варианте. Другими словами, скалывание кристалла для получения свежей поверхности приводит к неупорядоченному расположению на ней интеркалированных атомов. Следующий, невозможный слой, расположенный на глубине $\sim 3-3.5 \text{ \AA}$, уже не наблюдается из-за поглощения фотоэлектронов. В описанных условиях эксперимента выход электронов отражает преимущественно химическую связь и симметрию половины сэндвича TiX_2 на поверхности образца в направлении гексагональной оси (перпендикулярной поверхности монокристалла). После удаления верхнего слоя поверхность образца содержит структурные фрагменты двух типов. Поэтому регистрируются электроны, эмиттированные из фрагментов кристалла, которые представляют собой пирамиды $TiTe_3$ и сопряженные основаниями пирамиды $TiTe_3Fe$ (рис. 2). Их количественное отношение для $Fe_{1/4}TiTe_2$ составляет $1/8$. В этих полиэдрах отсутствуют (или подавлены) операции инверсии и отражения относительно базисной плоскости. Тогда на угловую зависимость фотоэмиссии из $3d$ -состояний железа при заданной энергии возбуждения действуют лишь оставшиеся элементы пространственной симметрии.

Атомы титана и теллура имеют идентичных ближайших соседей во второй координационной сфере в слое. В отличие от них расстояние между ближайшими атомами железа составляет не менее трех координационных сфер в слое. Поэтому в соответствии с кристаллической структурой соединения основным элементом симметрии для титана и теллура является ось вращения порядка 6. Для атомов железа ситуация качественно иная. Из-за слабости химической связи интеркалированного железа с решеткой-матрицей разумно считать, что каждый из атомов железа в его подрешетке имеет ось вращения типа ∞ относительно оси c . По нашим данным энергия связи остовных уровней атомов железа не изменяется по сравнению с металлической. Энергия связи остовного уровня $Ti2p_{3/2}$ в рассматриваемом соединении равна 455 eV . Эта величина больше на 1 eV соответствующей энергии в металле и отображает преобладание ионной составляющей химической связи Ti в состоянии окисления $4+$. Из-за резкого сокращения интенсивности эмиссии от нижней половины сэндвича $TiTe_6$ симметрия вращения в $M(M')$ эффективно повышается.

Во всем диапазоне изменения полярного угла, исключая $\vartheta = 0$, имеет место некопланарное расположение нормали к поверхности \mathbf{z} монокристалла, волнового вектора налетающего фотона \mathbf{p} и импульсов регистрируе-

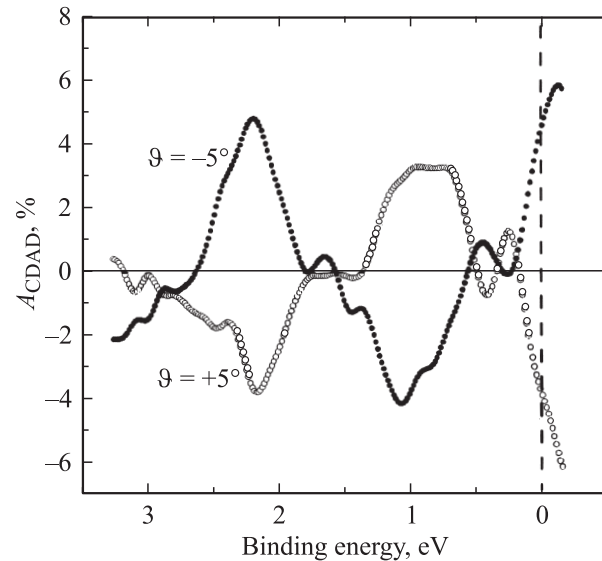


Рис. 4. Зависимость величины дихроизма от энергии связи в окрестности точки Γ в угловом диапазоне полярного угла $\Delta\vartheta = \pm 5^\circ$.

мых электронов \mathbf{k}_e . При $\vartheta = 0$ направление наблюдения фотоэлектронов совпадает с направлением кристаллографической оси $[001]$ кристалла и ΓA в зоне Бриллюэна (рис. 2). Как неоднократно показано в [11,12], дихроизм, наблюдаемый в некопланарной геометрии, отражает собственные физические (принадлежащие объекту) свойства объекта, а именно операции симметрии. Если в этом случае отсутствует инверсия или отражение, то взаимодействие право- и левополяризованных фотонов с веществом неинвариантно. При $\vartheta = 0$ геометрия эксперимента копланарна, и в этой точке матричные элементы вероятности перехода электронов в конечное состояние континуума для двух типов поляризации одинаковы по величине [11], т.е. дихроизм отсутствует. При изменении знака ϑ величина дихроизма также меняет знак, поскольку „дихроизм“ является нечетной функцией угла эмиссии электронов ϑ [11].

На рис. 3, *a, b* представлены результаты исследования Fe_xTiTe_2 в направлениях GK и GM зоны Бриллюэна при возбуждении фотонами с противоположной круговой поляризацией. В правой части рис. 3, *a* приведена величина дихроичного эффекта в зависимости от энергии связи и полярного угла в GK . Полоса, наблюдаемая в обоих направлениях непосредственно ниже энергии Ферми, не показывает видимой дисперсии во всем угловом диапазоне. Это может означать, что в эмиссии не участвует спектральный максимум, который может находиться выше энергии Ферми в незанятой части валентной полосы.

В обоих направлениях дихроизм достигает значительной величины при удалении от Γ (рис. 3, *a, b*; 4). В направлении GK в угловом диапазоне в окрестности $\vartheta = \pm 6^\circ$ и интервале энергии связи от 0 до -1 eV хорошо видна инверсия интенсивности при разной по-

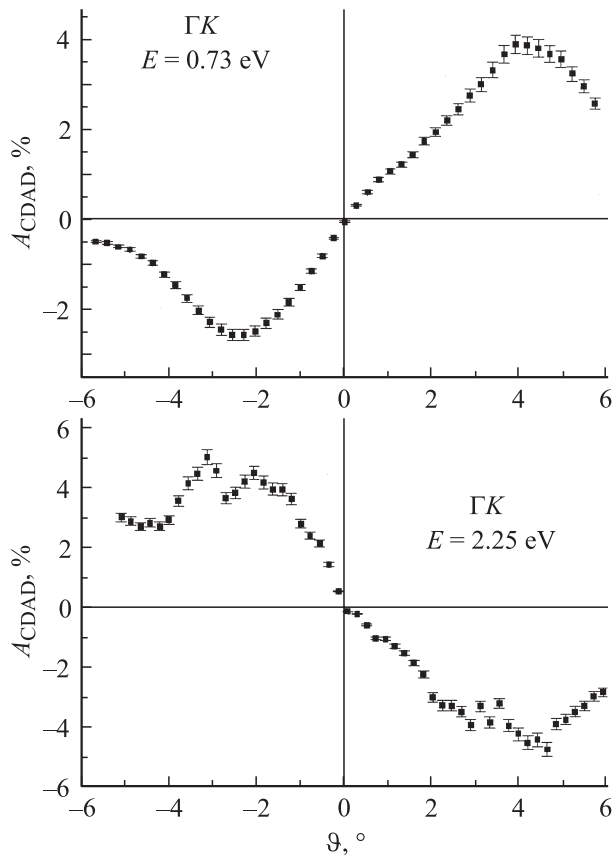


Рис. 5. Зависимость величины дихроизма в направлении ГК для двух полос с энергией связи 0.73 и 2.25 эВ.

ляризации. В точке Г дихроизм показывает регулярное поведение в соответствии с энергетическим положением полос (рис. 4). Показанная на рис. 3,а (ГК) величина дихроизма вблизи Г ($\Delta\varphi = 2^\circ$) близка к нулю во всем энергетическом диапазоне. При удалении от Г как в сторону положительных, так и отрицательных углов поведение кругового дихроизма угловой зависимости фотоэмиссии (CDAD) изменяется (рис. 5), и он достигает 5%. Отметим, что CDAD одинаков по величине для всех полос, однако имеет разный знак по обе стороны от Г соответственно. Напротив, в окрестности точки Г (в направлении ГМ) дихроизм четен и достигает величины 15–20% в диапазоне ниже энергии Ферми, в остальном энергетическом диапазоне CDAD по абсолютной величине почти не отличается от рассмотренного аналогичного случая для ГК. Отметим здесь, что схема эксперимента выбрана таким образом, что в проекциях на оси X и Z направления кругополяризованного излучения противоположно. Эту особенность эксперимента можно использовать при анализе орбитальной симметрии экспериментально зарегистрированных полос и сопоставить с результатами теоретических расчетов. Максимальное значение A_{CDAD} в направлении ГК составляет 15%. Эффекты, связанные с энергетическим разрешением, приводят к кажущемуся

сдвигу величины дихроизма относительно положения, соответствующего максимальной интенсивности полос, которое наблюдается в спектрах.

Механизму проявления циркулярного дихроизма и его угловой зависимости в фотоэмиссии посвящен ряд теоретических расчетов, например [11–13]. Как следует из этих расчетов, CDAD отражает взаимодействие циркулярно поляризованных фотонов с полным моментом возбуждаемого атома и наблюдается независимо от магнитного состояния образцов. Согласно модельным расчетам, одной из причин CDAD является интерференция соответствующих конечных состояний с проекцией угловых моментов $l + 1$ и $l - 1$. Эта интерпретация согласуется с результатами теоретических расчетов угловой зависимости фотоэмиссии в [6], выполненных для TaS₂ в условиях возбуждения циркулярно поляризованным излучением. Отметим, что в этом расчете [6] модельные условия съемки далеки от реальных.

Другой особенностью спектров Fe_xTiTe₂ является появление дополнительной почти бездисперсионной полосы с энергией связи 0.78 эВ в направлении ГМ (рис. 3,б). Согласно зонному расчету [1], эта полоса обусловлена Fe3d–Ti3d-гибридизацией и является спин-поляризованной. В чистом неинтеркалированном соединении такая полоса не обнаружена [8].

Особенно отчетливо эффект возникновения и подавления дихроизма проявляется при изменении углового диапазона в окрестности точки Г в направлении ГК (рис. 3–5). В точке Г наблюдаются полосы с энергией связи 0.1, 0.7, 1.7, 2.2 эВ (рис. 3,а). Как отмечено выше, верхняя полоса проявляется в спектре занятых состояний неполностью и поэтому неадекватно отражает дихроичный эффект. Хорошо определяется положение трех остальных полос (рис. 3,а). Особый интерес вызывает качественное различие в поведении дихроизма в направлениях ГК и ГМ, вызванное различием их симметрии в зоне Бриллюэна. Для дихалькогенидов интеркалированные атомы в основном определяют физические свойства. Поэтому нас интересуют именно Fe3d-состояния и их распределение в **k**-пространстве.

Расчет электронной структуры выполнен в рамках теории функционала плотности с использованием полнопотенциального метода присоединенных плоских волн, реализованного в компьютерной программе WIEN2k [14]. Дихалькогенид титана, допированный атомами железа (одним на четыре формульные единицы), моделировался периодической сверхъячейкой гексагональной структуры (пространственная группа $P - 3m1$, номер 164) с экспериментально определенными параметрами решетки $a = 2 \cdot 3.8109 \text{ \AA}$, $c = 6.345 \text{ \AA}$ и координатами атомов Fe(0, 0, 1/2); Ti(0, 0, 0); $3 \times \text{Ti}(1/2, 0, 0)$; $6 \times \text{Te}(1/6, 5/6, z)$; $2 \times \text{Te}(2/3, 1/3, z)$ с внутренним параметром $z = 0.26552$. Обменно-корреляционный потенциал был выбран в приближении локальной спиновой плотности. Периодичность использованной сверхъячейки формально соответствует ферромагнитному упорядочению магнитных моментов

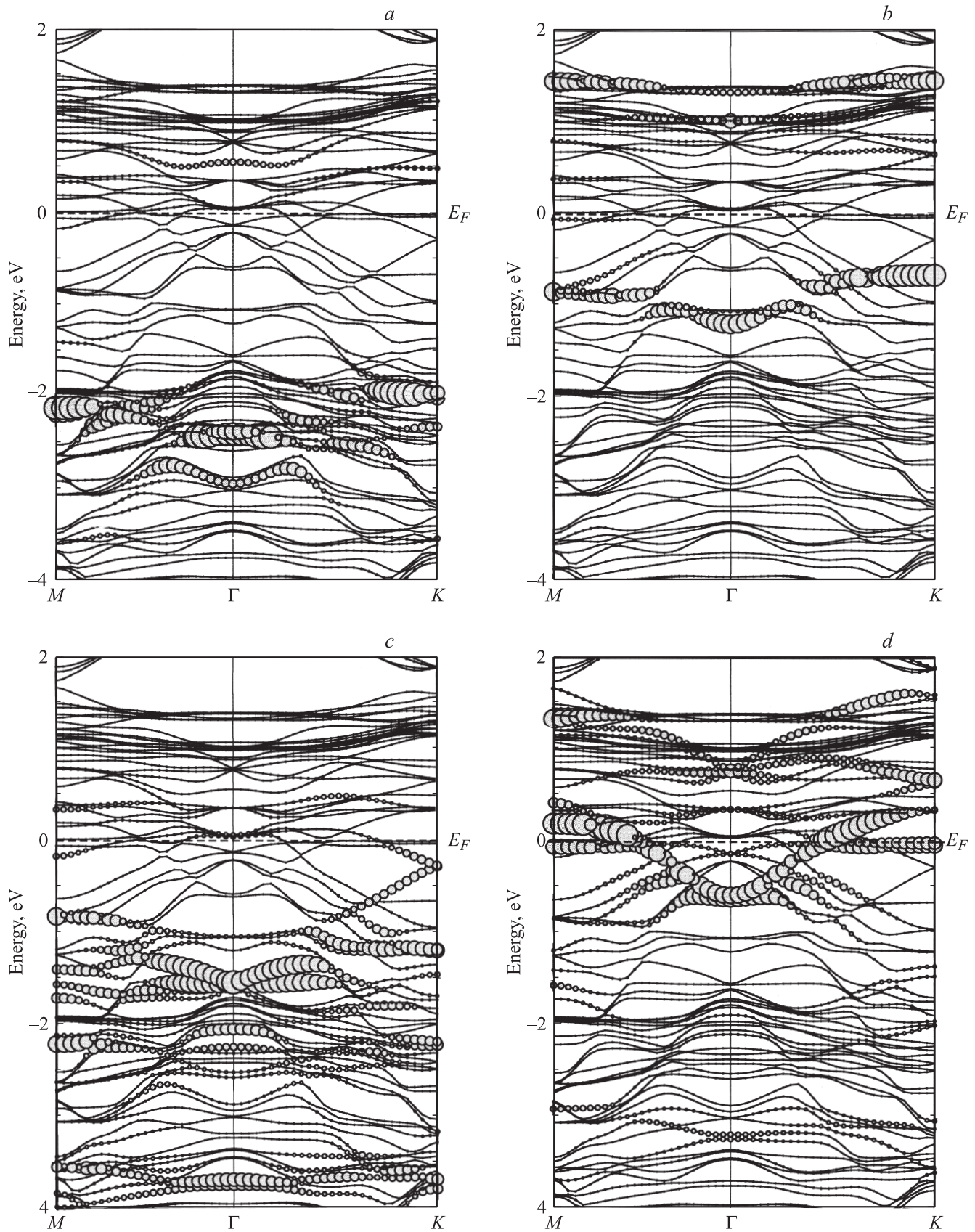


Рис. 6. Данные расчета для Fe3d-состояний в $\text{Fe}_{1/4}\text{TiTe}_2$. *a* — d_z^2 со спином вверх, *b* — d_z^2 со спином вниз, *c* — $d_{x^2y^2+xy}$ со спином вверх, *d* — $d_{x^2y^2+xy}$ со спином вниз.

Энергия связи E (eV) Fe3d-полос для FeTi₄Te₈ согласно теоретическим расчетам в окрестности точки Γ и эксперименту

№	Fe3d \uparrow			Fe3d \downarrow			Эксперимент
	d_{xz+yz}	$d_{x^2y^2+xy}$	d_z^2	d_{xz+yz}	$d_{x^2y^2+xy}$	d_z^2	
1				0–0.3			0–0.3
2					0.6		0.7–1.0
3	1.0	1.0–1.2				1.2	1.25
4			2.3				2.3
	(YZ), (XY), (XZ)	(XZ), (YZ), (XY)	(XY)				

Примечание. В нижней строке указаны плоскости симметрии для орбиталей в глобальной системе координат, показанной на рис. 2. Все плоскости симметрии являются плоскостями скольжения, кроме плоскости (YZ) для случая, когда кристаллографическое направление [120] (ГМ) совпадает с осью Z. Направление спина вверх и вниз указано стрелками. При идентификации симметрии экспериментально наблюдаемых полос в спектрах мы учитывали: их энергетическое положение и мощность (заполнение), полученные из расчета; наложение полос, связанных с орбиталями различной симметрии; поведение дихроизма в окрестности точки Γ .

атомов железа. Однако из-за большого расстояния между последними их взаимодействие чрезвычайно слабо, и в их электронной структуре проявляются локализованные состояния, характерные для магнитных примесей.

На рис. 6 показана дисперсионная зависимость $E(\mathbf{k})$ различной орбитальной симметрии Fe3d-состояний из модельного расчета Fe_{1/4}TiTe₂. Отметим здесь, что по данным работы [15], в которой были выполнены РФС-исследования валентных полос монокристаллов Fe_xTiTe₂ с различным содержанием железа, Fe3d-состояния локализованы в энергетической области $-2.5-0\text{eV}$ под уровнем Ферми. Поэтому при анализе спектров ограничимся этой энергетической областью. На рис. 6 представлены данные расчета $E(\mathbf{k})$, включая Fe3d-состояния, в таблице — теоретические и экспериментальные энергии связи полос, соответствующих различной орбитальной симметрии. В нижней части таблицы указаны плоскости зеркального отражения для этих полос в выбранной системе координат (рис. 2). Экспериментально наблюдаемая зависимость величины дихроизма от энергии связи в валентной зоне показана на рис. 3. Инверсия знака дихроизма при удалении от точки Γ вызвана, как это уже упоминалось, нечетным поведением дихроизма.

В таблице приведено энергетическое положение Fe3d-орбиталей в окрестности Γ . В порядке увеличения энергии связи в верхней части занятой зоны находится $3d_{xz+yz}$ -орбиталь, далее следуют $3d_{x^2y^2+xy}$ - и нижняя $3d_z^2$ -орбитали. Как видно из таблицы и приведенных на рис. 6 кривых $E(\mathbf{k})$, в точке Γ смешиваются орбитали со спином вверх $3d_{x^2y^2+xy}$ и $3d_{xz+yz}$. Наиболее близко соответствуют по энергии экспериментально наблюдаемые полосам с энергией $E = 0.73$ и 2.25eV (рис. 4) орбиталь со спином вниз $3d_{x^2y^2+xy}$ и орбиталь со спином вверх $3d_z^2$ соответственно, которые, согласно расчету, при этих энергиях в точке Γ не смешиваются с другими Fe3d-орбиталями. Знак дихроизма для полос с энергией $E = 0.73$ и 2.25eV противоположен. Хотя орбитали $3d_{x^2y^2+xy}$ со спином вниз и $3d_z^2$ со спином вверх имеют различную спиновую поляризацию, в данном случае это не имеет отношения к поведению дихроизма по причинам, которые обсуждались выше. На наш взгляд,

причиной различия дихроизма этих полос является различие пространственной симметрии соответствующих орбиталей относительно системы координат, связанной с кристаллом (рис. 2). В этой системе координат главные поворотные оси рассматриваемых орбиталей параллельны оси Z. Проекция импульса фотона на координатные плоскости XY и YZ имеет противоположный знак, т.е. круговая поляризация противоположна вдоль положительных направлений осей X и Z. Поэтому, если для орбиталей со спином вниз $3d_{x^2y^2+xy}$ и $3d_z^2$ со спином вверх плоскостями отражения являются взаимно перпендикулярные плоскости XZ и XY, электроны соответствующих орбиталей возбуждаются излучением с противоположной круговой поляризацией, и знак дихроизма для них противоположен. В теоретическом расчете [1] приведено сечение электронной плотности, параллельное оси ϵ с кристаллом $Me_x\text{TiSe}_2$ ($Me = Cr, Co$), из которого видно, что 3d-электроны атомов Me сильно поляризованы в направлении атомов Se, и химическая связь между интеркалированными атомами и Se осуществляется с помощью гибридных $Me3d_{(x^2-y^2),xy,xz,yz}$ -орбиталей. Поскольку в экспериментальных условиях съемки атомы Fe находятся на поверхности кристалла, ветви этих орбиталей несимметричны относительно плоскости XY. Поэтому плоскостью отражения для них является ZY. Орбиталь $Fe3d_z^2$ почти не участвует в химической связи, и ее симметрия близка к атомной. Поэтому ее основной плоскостью отражения является плоскость XY.

Результаты наших исследований позволяют проводить анализ и отчасти предсказать поведение интенсивности спин-поляризованных полос во внешнем магнитном поле кристалла Fe_xTiTe₂ с упорядоченной магнитной подрешеткой железа. В этом случае также должен наблюдаться дихроизм, вызванный хиральностью объекта, а его величина будет зависеть от направления вектора индукции магнитного поля в образце. При упорядочении магнитного момента в подрешетке интеркалированных атомов могут возникать дополнительные плоскости отражения. Это приведет к изменению знака дихроизма для соответствующих подполос.

4. Заключение

Выполнены экспериментальные измерения дихроизма эмиссии валентных электронов от монокристалла $Fe_{1/4}TiTe_2$ при возбуждении циркулярно поляризованным синхротронным излучением с энергией 20.5 eV. Такое излучение имитирует типичный источник ультрафиолетового излучения атомов He. При возбуждении с подобной энергией в угловой зависимости спектров частично утрачена информация о симметрии кристалла, включая орбитали валентных электронов. Причиной этого является малая длина свободного пробега фотоэлектронов в кристалле, не превышающая размеров элементарной ячейки, имеющей все элементы симметрии. Особенно это касается низкосимметричных систем, таких как квазидвумерные дихалькогениды. Такая кажущаяся неполнота спектральных данных позволяет определить орбитальную симметрию некоторых полос. Обнаружена угловая зависимость дихроизма отдельных полос, которые по данным теоретических расчетов образованы преимущественно $Fe3d$ -состояниями. Установлено, что угловая зависимость этих полос определяется пространственной симметрией кристалла и молекулярных орбиталей $Fe3d$ -электронов.

Авторы благодарят В.И. Гребенникова за обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] A.V. Postnikov, M. Neumann, St. Plogmann, Yu.M. Yarmoshenko, A.N. Titov, A.V. Kuranov. *Comput. Mater. Sci.* **17**, 450 (2000).
- [2] В.Г. Плещёв, А.Н. Титов, С.Г. Титова, А.В. Куранов. *Неорган. материалы* **33**, 1333 (1997).
- [3] X.Y. Cui, H. Negishi, S.G. Titova, K. Shimada, A. Ohnishi, M. Higashiguchi, Y. Miura, S. Hino, A.M. Jahir, A. Titov, H. Bidad, S. Negishi, H. Namatame, M. Taniguchi, M. Sasaki. *Phys. Rev. B* **73**, 085 111 (2006).
- [4] A.N. Titov, A.V. Kuranov, V.G. Pleschev, Yu.M. Yarmoshenko, M.V. Yablonskikh, A.V. Postnikov, S. Plogmann, M. Neumann, A.V. Ezhov, E.Z. Kurmaev. *Phys. Rev. B* **63**, 035 106 (2001).
- [5] N.V. Smith, M.M. Traum. *Phys. Rev. B* **11**, 2087 (1975).
- [6] T. Matsushita, S. Imada, H. Diamon, T. Okuda, K. Yamaguchi, H. Miyagi, S. Suga. *Phys. Rev. B* **56**, 7687 (1997).
- [7] C.J. Powell, A. Jablonski. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **28**, 19 (1999).
- [8] T.V. Kuznetsova, M.V. Yablonskikh, A.V. Postnikov, G. Nicolay, B. Eltner, F. Reinert, Y.M. Yarmoshenko, A.N. Titov, J. Nordgren. *J. Electron Spectroscopy Related Phenomena* **137–140**, 481 (2004); T.V. Kuznetsova, A.N. Titov, Yu.M. Yarmoshenko, E.Z. Kurmaev, A.V. Postnikov, G. Pleschev, B. Eltner, G. Nicolay, D. Ehm, S. Schmidt, F. Reinert, S. Hüfner. *Phys. Rev. B* **72**, 085 418 (2005).
- [9] T. Matsushita, S. Suga, Y. Tanake, H. Shigeoka, T. Nakatani, T. Okuda, T. Terauchi, T. Shishidou, A. Kimura, H. Daimon, S.-I. Oh, A. Kakizaki, Toyohiko Kinoshita, H. Negishi, M. Inoue. *J. Electron. Spectr.* **78**, 477 (1996).
- [10] H. Martinez, Y. Tison, I. Baraile, M. Loudet, D. Gonbeau. *J. Electron. Spectr.* **125**, 181 (2002).
- [11] R.L. Dubs, S.N. Dixit, V. McKoy. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1249 (1985).
- [12] D. Venus. *Phys. Rev. B* **56**, 2661 (1997).
- [13] D. Venus, W. Kuch, A. Dittschar, M. Zharnikov, C.M. Schneider, J. Kirschner. *Phys. Rev. B* **52**, 6174 (1995).
- [14] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Trickey. *Comput. Phys. Commun.* **59**, 339 (1990); <http://url.wien2k.at>.
- [15] A.N. Titov, S.G. Titova, M. Neumann, V.G. Pleschev, Yu.M. Yarmoshenko, L. Krasavin, A. Dolgoshein, A. Kuranov. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **311**, 161 (1998).