

Полученные выражения (6), (6а), (7) являются достаточно общими и могут быть использованы при создании высокочастотных фарадеевских модуляторов света на феррогранатах [8, 15], в теории эллипсометрии анизотропных сред [16-18], для определения параметров анизотропных кристаллов, в том числе магнитоупорядоченных [19], для расчета оптических систем записи, обработки [20] и визуализации [10] информации на магнитных кристаллах.

Литература

- [1] М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. «Наука», М., 1973.
- [2] М. М. Горшков. Эллипсометрия. «Сов. радио», М., 1974.
- [3] Ф. В. Лисовский, О. С. Маркелова. Радиотехн. и электрон., № 8, 1951, 1975.
- [4] Л. М. Барковский. Кристаллография, 22, 21, 1977.
- [5] G. Szuveasy. In: Handbuch der Physik. XX. Berlin, 1928.
- [6] Б. В. Бокуть, А. Н. Сердюков, Ф. И. Федоров. Кристаллография, 15, 1002, 1970.
- [7] Г. Н. Борздов. Весці АН БССР, сер. фіз.-мат. н., № 3, 85, 1977.
- [8] И. С. Мелищук, В. Д. Тронько. Опт. и спектр., 41, 475, 1976.
- [9] D. Holmes. J. Opt. Soc. Am., 54, 1113, 1964.
- [10] А. М. Балбашов, А. А. Комлев, А. Л. Микаэлян, А. К. Столяров, А. Я. Червоненкис. Квант. электрон., 4, 1933, 1977.
- [11] Ф. И. Федоров. Теория гиротропии. «Наука и техника», Минск, 1976.
- [12] Л. М. Барковский. Опт. и спектр., 34, 1193, 1973.
- [13] Б. В. Бокуть, С. С. Гиргель. Кристаллография, 21, 264, 1976; 269, 1976.
- [14] А. М. Гончаренко, Ф. И. Федоров. Опт. и спектр., 14, 94, 1963.
- [15] В. В. Спорик, В. Д. Тронько, В. И. Цимбаревич. ФТТ, 16, 1517, 1974.
- [16] К. К. Свиташев, Е. С. Филатова. Опт. и спектр., 40, 1064, 1976.
- [17] А. И. Семененко, Ф. С. Миронов. ФТТ, 18, 3511, 1976.
- [18] B. M. Azzam, N. M. Bashara. J. Opt. Soc. Am., 64, 128, 1974.
- [19] W. J. Taber, F. S. Chen. J. Appl. Phys., 40, 2760, 1969.
- [20] Г. А. Смоленский, В. В. Леманов. Ферриты и их техническое применение. «Наука», Л., 1975.

Поступило в Редакцию 13 мая 1978 г.

УДК 535.34-32 : 546.621

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ $L_{II, III}$ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ АЛЮМИНИЯ В AlF_3

А. А. Павлычев, А. С. Виноградов, Д. Е. Оношко и С. А. Титов

Расчеты на основе зонной теории не дают полного объяснения особенностей структуры рентгеновских спектров поглощения большинства ионных кристаллов вблизи порога ионизации внутренних электронных оболочек [1]. Это связано, по-видимому, с недостаточным учетом в рамках зонной модели влияния рентгеновской вакансии и атомов ближайшего окружения. Важная роль ближайшего окружения в формировании указанной выше структуры проявляется при сопоставлении рентгеновских спектров поглощения молекул и твердых тел [2].

В данной работе изучаются особенности хода сечения фотопоглощения выше порога ионизации $L_{II, III}$ уровня Al в кристалле AlF_3 [3], возникающие в результате рассеяния на атомах ближайшего окружения фотоэлектрона, вырванного из 2р-оболочки иона алюминия. В связи с этим нами был выполнен модельный расчет для кластера $[AlF_6]^{-3}$, симметрия которого совпадает с точечной группой симметрии кристалла AlF_3 . Ограничение в расчете одной координационной сферой для иона алюминия оправдывается тем фактом, что коэффициент отражения фотоэлектрона с энергией до 2 Ry от октаэдра из атомов фтора практически равен 1 [4]. Влияние кристаллического потенциала на кластер учитывалось путем введения заряженной сферы Ватсона. Заряд на сфере Ватсона выбирался таким, чтобы суммарный заряд кластера был равен нулю.

Распределение плотности сил осцилляторов для перехода внутреннего электрона в континууме представляется в виде

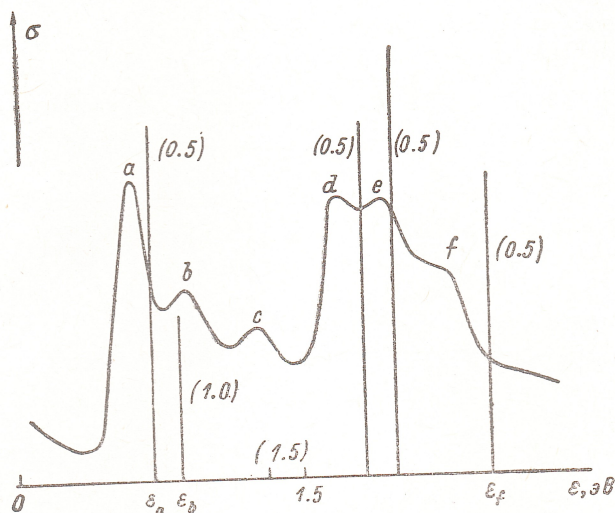
$$\frac{df}{d\omega} = 2\omega \left| \int \psi_0(r) r \chi_s(r) dr \right|^2, \quad (1)$$

где ω — частота падающего излучения, ψ_0 — волновая функция 2р-электрона Al, χ_s — волновая функция электрона в конечном состоянии. Нахождение $\chi_s(r)$ производилось с использованием формализма метода многократно рассеянных волн со ста-

стистической аппроксимацией обменного потенциала [5] в два этапа: 1) определение потенциала с учетом влияния вакансии на $L_{II, III}$ оболочке, 2) отыскание самой χ_s путем решения системы уравнений, описывающих упругое рассеяние фотоэлектрона на данном потенциале [6, 7].

На рисунке кривая воспроизводит экспериментальный $L_{II, III}$ спектр Al в AlF_3 [3], вертикальными линиями указаны энергетические положения найденных максимумов распределения плотности сил осцилляторов, причем их величина взята пропорциональной квадрату матричного элемента в (1). Положение порога ионизации для AlF_3 оценивалось по данным работы [2], эта энергия принималась за начало отсчета экспериментальной кривой и сопоставлялась значению $df/d\omega$ при $\epsilon=0$.

Сравнение рассчитанных и экспериментальных результатов (см. рисунок) показывает, что учет рассеяния фотоэлектрона в пределах используемой модели в целом описывает наблюдаемые особенности поведения сечения фотопоглощения. На основании полученных результатов максимумы поглощения можно интерпретировать как пе-



Кривая — экспериментальный спектр Al в AlF_3 [3]. Вертикальные линии — положения рассчитанных максимумов переходов внутреннего 2p-электрона в квазистационарные состояния. В скобках указаны полученные полуширины максимумов.

реходы 2p-электрона в квазистационарные состояния, классифицируемые по неприводимым представлениям точечной группы симметрии кристалла O_h . С учетом дипольных правил отбора это будут состояния: ϵa_{1g} , ϵe_g и ϵt_{2g} .

Максимумы a , b связаны с переходами $t_{1u} (2p) \rightarrow \epsilon a_{1g}$ и ϵt_{2g} соответственно. Структура полосы d , e сопоставляется суперпозиции ϵt_{2g} - и ϵe_g -переходов, однозначная идентификация здесь затруднена. Происхождение f -пика связано, по-видимому, с $t_{1u} \rightarrow \epsilon f e_g$ -переходом. Максимум вероятности перехода $t_{1u} \rightarrow \epsilon a_{1g}$ хорошо совпадает с полосой поглощения c , однако найденная величина квадрата матричного элемента в этом случае значительно уступает переходам в состоянии, генетически связанным с d -парциальной волной (e_g и t_{2g}). Сопоставление полученных результатов с результатами для $[SiF_6]^{2-}$ [3] показывает, что в случае $[SiF_6]^{2-}$ появление квазистационарного уровня в E_g -представлении происходит при значительно больших энергиях, т. е. максимум ϵa_{1g} (см. рисунок) не имеет аналога в случае $[SiF_6]^{2-}$. Причина этого различия пока не совсем понятна.

Заметим, что сравнение максимумов по интенсивности затруднено, так как экспериментальные результаты [3] получены методом квантового выхода, который не дает правильного отношения сил осцилляторов. Было бы преждевременно утверждать, что приведенная выше интерпретация является окончательной, однако полученные результаты свидетельствуют о важной роли атомов ближайшего окружения на формирование структуры поглощения рентгеновского излучения в припороговой области для ионных кристаллов.

Литература

- [1] S. T. Pantelides. Phys. Rev., B11, 2391, 1975.
- [2] В. И. Нефедов, Ю. А. Буслаев, Н. П. Сергушин, Л. Байер, Ю. В. Кокунов, А. А. Кузнецова. Изв. АН СССР, сер. физ., 33, 448, 1974.
- [3] В. И. Нефедов, В. А. Фомичев. Ж. структурн. хим., 9, 279, 1968.

- [4] Р. В. Ведринский, В. Л. Крайзман. Изв. АН СССР, сер. физ., 40, 2420, 1976.
 [5] K. H. Johnson. Adv. quant. chem., 7, 143, 1973.
 [6] D. Dill, J. L. Dehmer. J. Chem. Phys., 61, 693, 1974.
 [7] Р. В. Ведринский, А. П. Ковтун, В. В. Колесников, Ю. Ф. Мигаль, Е. В. Положенцев, В. П. Саченко. Изв. АН СССР, сер. физ., 38, 434, 1974.
 [8] А. А. Павлычев, А. С. Виноградов, Д. Е. Оношко, С. А. Титов. ФТТ, 20, 3672, 1978.

Поступило в Редакцию 21 июля 1978 г.

УДК 535.375 : 548.0

О ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ЛИНИЙ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА МАЛЫХ ЧАСТОТ ОТ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

А. В. Коршунов и Л. И. Мамизерова

В предыдущей работе [1], посвященной исследованию спектров малых частот кристаллов с одной молекулой в ячейке, было показано влияние индивидуальных особенностей молекул на интенсивности вращательных качаний молекул. Согласно формуле

$$I_{(L)} = \text{const} \frac{h}{8\pi^2 \nu_k J_L} (\alpha_M - \alpha_N)^2 \frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu_k}{kT}}} A,$$

интенсивность малых частот зависит от строения молекулы (их оптической анизотропии, моментов инерции и др.). Целью настоящей работы является изучение зависимости интенсивностей от ориентационного множителя A , численные значения которого зависят от ориентации молекулы в кристалле.

В качестве объекта исследования был выбран кристалл резорцина. Резорцин исследовался в двух модификациях: α -форме при 293 К и β -форме при 347 К. Оба кристалла образованы из одинаковых молекул $\mu\text{-C}_6\text{H}_4(\text{OH})_2$, относятся к одной пространственной группе симметрии C_{2v}^2 , содержат по четыре молекулы в ячейке, но отличаются строением сеток водородных связей, а также ориентацией молекул в кристаллической решетке, согласно [2]. Молекула резорцина имеет некоторый дипольный момент. Поэтому для решетки этого вещества характерно добавочное дипольное взаимодействие, которое отсутствует в кристаллах, образованных из центросимметричных молекул (бензол, нафталин, дурол и др.), исследованных нами ранее [3].

Более того упаковка в кристалле резорцина определяется прочными водородными связями, о влиянии которых на спектры малых частот мало известно. По правилам отбора в спектре рассеяния резорцина следует ожидать появления 12 вращательных и 9 трансляционных частот. На рисунке приведены спектры кристаллов α - и β -форм резорцина с указанием значений наблюдаемых частот. В таблице показаны результаты

α -форма			β -форма		
ν , см ⁻¹	симметрия	$I_{\text{расч.}}$	ν , см ⁻¹	симметрия	$I_{\text{расч.}}$
39	(Tr.)	—	42	(Tr.)	—
59	$A_1(N)$	10	52	$A_1(N)$	9
59*	$A_2(N)$	1	52*	$A_2(N)$	4
59*	$B_1(N)$	8	56	$B_1(N)$	2
59*	$B_2(N)$	13	56*	$B_2(N)$	8
79	$A_1(M)$	100	79	$A_1(M)$	25
79*	$A_2(M)$	2	79*	$A_2(M)$	100
79*	$B_1(M)$	25	79*	$B_1(M)$	6
79*	$B_2(M)$	5	97	$B_2(M)$	50
110	$A_1(L)$	23	105	$B_2(L)$	12
110*	$A_2(L)$	9	105*	$B_1(L)$	3
110*	$B_1(L)$	2	114	$A_1(L)$	99
110*	$B_2(L)$	10	114*	$A_2(L)$	4