УДК 621—315

СТРУКТУРА НЕСОИЗМЕРИМЫХ ФАЗ В СЛОИСТОМ СОЕДИНЕНИИ $1T$-VSe_2

И. Г. Кулеев, В. В. Кондратьев

Проанализированы межслойное взаимодействие волн зарядовой плотности (ВЗП) и возможные типы упаковок ВЗП в низкотемпературных фазах слоистого соединения $1T$-VSe_2. Вычислена интенсивность диффузного рассеяния рентгеновских лучей в различных моделях беспорядка при упаковке слоев ВЗП. Проведено сравнение развитой в работе теории с данными дифракционных экспериментов.

Согласно дифракционным данным [1-3], в слоистом соединении $1T$-VSe_2 при 100 K происходит фазовый переход (ФП) в $3q$-фазу, при котором возникает сверхструктура, соизмеримая с исходной решеткой в плоскости слоя ($a'=4a$), но несоизмеримая в поперечном направлении c (близкая к утроению периода). Ниже 80 K происходит второй ФП, когда амплитуда одной из трех ВЗП исчезает, а параметр несоизмеримости увеличивается. В работах [4, 5] нами была развита теория Ландау для описания ФП в $1T$-VSe_2 в предположении, что межслойное взаимодействие значительно меньше однослойной энергии [6-8]. Само по себе это предположение для слоистых структур оправданно, но правильнее следует сопоставлять энергию межслойного взаимодействия с фазовой частью однослойной энергии, от соотношения которых зависят фазировка ВЗП в слое и разности фаз в соседних слоях, приводящие к наблюдаемой несоизмеримой структуре (упаковке слоев).

В данной работе рассмотрено несколько моделей межслойного беспорядка, соответствующих как сильному однослойному, так определяющему межслойному взаимодействию. Для них вычислена интенсивность рассеяния рентгеновских лучей и проведено сравнение с данными дифракционных экспериментов [2]. Сделан вывод о существенной роли межслойного взаимодействия при формировании несоизмеримых фаз в $1T$-VSe_2 и показано, что в этих условиях наилучшему согласию с экспериментом отвечает неоднородная локально-соизмеримая упаковка слоев с элементами утроения и учетверения периода вдоль оси c.

1. Межслойное взаимодействие и возможные упаковки слоев

Свободная энергия, обусловленная межслойным взаимодействием ВЗП 2-го порядка, имеет вид [4]

$$\Delta F = \sum_{l,\, n>0} \int d\mathbf{r} \sum_{j=1}^{3} \mathrm{Re}\,\{G_n \Phi_{j,\, l+n} \Phi_{j,\, l}\}, \tag{1}$$

где l, n — номера слоев; $\Phi_{j,l}$ — параметр порядка. Ограничиваясь взаимодействием ВЗП в ближайших слоях ($G_1=|G|\exp(i\varphi_G)$, $G_{n>1}=0$) и учитывая, что $\Phi_{j,l}=\Delta\exp(i\theta_{j,l})$, для $3q$-фазы получим

$$\Delta F = \sum_l F_{l,\, l+1} = |G|\,\Delta^2 \sum_l \sum_j \cos(\varphi_G + \Delta\theta_{j,\, l}), \tag{2}$$

где $\Delta\theta_{j,l}=\theta_{j,l}-\theta_{j,\,l-1}$ — разность фаз в соседних слоях, Δ — амплитуда ВЗП. Для $2q$-фазы индекс j в выражениях (1), (2) принимает только два значения.

Возможность образования истинной несоизмеримости вдоль оси c можно сразу отбросить, так как в этом случае невозможно реализовать соизмеримую структуру в слое, поскольку фазовая часть однослойной свободной энергии [4]

$$F_\theta^{(l)}=-D_0\Delta_1\Delta_2\Delta_3\cos\sum_j\theta_{j,\,l}+E_1\sum_j\Delta_j^4\cos 4\theta_{j,\,l} \tag{3}$$

($\Delta_1=\Delta_2=\Delta_3\equiv\Delta$ для $3q$-фазы, $\Delta_1=\Delta_2\equiv\Delta$, $\Delta_3\simeq 0$ для $2q$-фазы) выпадает при суммировании по слоям. Минимизируя свободную энергию $F=\sum_l(F_\theta^{(l)}+F_{l,\,l+1})$ по $\theta_{j,\,l}$, легко показать, что длиннопериодные соизмеримые состояния в общем случае не являются равновесными. Отсюда следует, что в $1T$-VSe_2 может образовываться локально-соизмеримая неоднородная структура, аналогичная рассмотренной в [9].

Рассмотрим вначале случай малой межслойной энергии $|F_{l,l+1}|\ll F_\theta^{(l)}$. Тогда фазы ВЗП определяются из минимизации (3) и равны (далее рассматривается случай $E_1>0$, так как только тогда имеет место ФП $3q\to 2q$ [4]):

а) $3q_1$-фаза ($|D_0|\gg 4E_1\Delta$)

$$\theta_{j,\,l}^{(\alpha)}=\frac{\pi}{2}n_{j,\,l}+\frac{2\pi}{3}m_l,\qquad \sum_j n_{j,\,l}=\begin{cases}0 & (D_0<0)\\ 2 & (D_0>0)\end{cases}\qquad m_l=0,\ 1,\ 2, \tag{4}$$

$$F_\theta\,(\alpha=0)=-|D_0|\,\Delta^3+3E_1\Delta^4,\qquad F_\theta\,(\alpha=1,\ 2)=-|D_0|\,\Delta^3-{}^3/_2E_1\Delta^4, \tag{5}$$

б) $3q_2$-фаза ($|D_0|\ll 4E_1\Delta$), $2q$-фаза

$$\theta_{j,\,l}=\pi/4+\pi/2\cdot n_{j,\,l}, \tag{6}$$

$$F_\theta(3q_2)=-1/\sqrt{2}\cdot|D_0|\,\Delta^3-3E_1\Delta^4,\qquad F_\theta(2q)=-2E_1\Delta^4. \tag{7}$$

Фазировка с $m_l=0$ отвечает метастабильному состоянию, но учет межслойного взаимодействия может привести к его стабилизации.

От разности фаз ВЗП в соседних слоях $\Delta\theta_{j,\,l}^{(m)}=\pi/2\cdot\Delta n_{j,\,l}+2\pi/3\cdot m$ удобно перейти к упаковочным векторам $\mathbf{r}^{(m)}_{\Delta n_1,\,\Delta n_2}=(\Delta n_1+4m/3)\,\mathbf{a}_1+(\Delta n_2+4m/3)\,\mathbf{a}_2$ ($\mathbf{a}_i$ — векторы трансляций в слое исходной фазы), которые показывают смещение распределения зарядовой плотности от слоя к слою. Для сверхструктуры, имеющий период Nc, $\sum_{l=1}^{N}\mathbf{r}^{(m)}_{\Delta n_1,\,\Delta n_2}$ должна быть равна вектору трансляции в слое, т. е. $\sum\Delta n_{1,\,2}=4s_{1,\,2}$, $\sum m=3s_3$, s_i — целые числа. Введем обозначение слоев с фазировкой $\theta_{j,\,l}^{(\alpha)}$ при $\alpha=1,\ 2,\ 0$ соответственно A, B, C.

При $|D_0|>4E_1\Delta$ наинизшей энергией обладают слои A, B. Рассмотрим вначале упаковки типа $AA\ldots$, $BB\ldots$. Из рис. 1, *а*, где приведен график зависимости $F_{l,l+1}$ от угла φ_G, являющегося параметром теории, видно, что наинизшие значения межслойной энергии достигаются при $0<\varphi_G<116.6°$ для $\mathbf{r}_{11}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{12}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{21}^{(0)}$, при $116.6°<\varphi_G<243.4°$ для $\mathbf{r}_{00}^{(0)}$, при $243.4°<\varphi_G<360°$ для $\mathbf{r}_{33}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{23}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{32}^{(0)}$ (соответствующие этим случаям кривые *1*, *2*, *3*).

Вторая область углов не представляет интереса, так как если бы $116.6°<\varphi_G<243.4°$, то период вдоль оси c не должен был бы измениться, что противоречит эксперименту. В третьей области углов φ_G получаются структуры, двойникованные по отношению к упаковкам при $0<\varphi_G<116.6°$. Поэтому будем в дальнейшем считать для определенности, что $0<\varphi_G<116.6°$. В этой области возможны следующие соизмеримые упаковки: $3c$ (повторяются в любой комбинации три различных вектора упаковки, например $\mathbf{r}_{11}^{(0)}\mathbf{r}_{12}^{(0)}\mathbf{r}_{21}^{(0)}$), $4c$ (повторяется один из трех векторов упаковки), $8c$ (повторяются любые два из трех векторов упаковки). Эти упаковки равновероятны, так как имеют одинаковую энергию и поэтому должны приводить к сильному межслойному беспорядку (только учет взаимодействия ВЗП в следующих слоях $F_{l,\ l+2}$ приводит к понижению энергии $3c$ структуры по сравнению с $4c$, если φ_G лежит в третьей области углов).

Энергетически более выгодными являются упаковки типа $ABBA$. . . (а) и $ABAB$. . . (б), так как $(F_{A,\ B}+F_{B,\ A})<2F_{A,\ A}$ (рис. 1, *б*), где $F_{A,\ B}=F_{l,\ l+1}$. В этом случае минимальную энергию имеет упаковка AB с вектором $\mathbf{r}_{00}^{(1)}$ (кривая *2*); конкурирующей с упаковкой AA (кривая *1*) является BA с векторами $\mathbf{r}_{33}^{(2)}$, $\mathbf{r}_{23}^{(2)}$, $\mathbf{r}_{32}^{(2)}$ (кривая *3*). В упаковках типа (а) утроение периода вдоль c можно получить тремя упаковками: $\mathbf{r}_{0}^{(1)}\mathbf{r}_{11}^{(0)}\mathbf{r}_{33}^{(2)}$, $\mathbf{r}_{0}^{(1)}\mathbf{r}_{12}^{(0)}\mathbf{r}_{32}^{(2)}$, $\mathbf{r}_{0}^{(1)}\mathbf{r}_{21}^{(0)}\mathbf{r}_{23}^{(2)}$. Далее следуют длиннопериодные структуры $9c$, $12c$, ... Упаковки типа (б) приводят к структурам $6c$, $8c$, $12c$, ... Общим для всех этих упаковок является многовариантность, что должно приводить к сильному межслойному беспорядку.

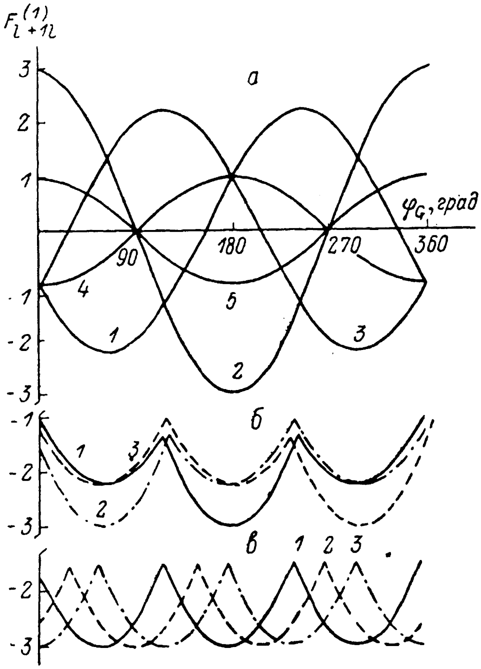

Рис. 1. Графики зависимостей $F_{l,\ l+1}$ от угла φ_G.

а: для упаковок типа AAA. . ., BBB. . . . Кривая *1* соответствует упаковочным векторам $\mathbf{r}_{11}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{12}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{21}^{(0)}$, *2* — $\mathbf{r}_{00}^{(0)}$, *3* — $\mathbf{r}_{33}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{23}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{32}^{(0)}$; *б*: упаковки AA (*1*), AB (*2*), BA (*3*); *в*: те же зависимости для структур $3c$ (*1*), $4c$ (*2*), $2c$ (*3*).

Иная ситуация возникает, если межслойная энергия становится сравнимой с фазовой частью однослойной энергии. Тогда энергетически выгодной уже будет упаковка ABC. . . (в), реализующаяся единственным способом. Исходя из рис. 1, *б* и выражений (2), (5), следует, что для этого необходимо выполнение условия

$$|F_{A,\ B}-F_{B,\ A}|>3E_1\Delta^4. \tag{8}$$

Вследствие конкуренции однослойной и межслойной энергий в этой структуре возможны ошибки упаковки, т. е. существует вероятность, что после слоя B следует не C, а A или B: $ABCABABC$. . . или $ABCABBCA$ . . . . Ниже будет показано, что вычисленное для этих структур рассеяние рентгеновских лучей нельзя согласовать с данными эксперимента [2]. При условии $|F_{l,\ l+1}|>F_\theta$, кроме структуры ABC. . ., должны быть включены в рассмотрение структуры с удвоением периода $\theta_{j,\ l}^{(2c)}=\pi l+\pi/4$ (г) и с учетверением периода $\theta_{j,\ l}^{(4c)}=\pi/2\cdot l+\pi/4$ (д). Из сравнения энергий структур $3c$, $2c$, $4c$ (рис. 1, *в*)

$$F^{(3c)}=-|D_0|\,\Delta^3+3\,|G|\,\Delta^2\cos(\varphi_G+2\pi/3),$$
$$F^{(2c)}=-3E_1\Delta^4-3\,|G|\,\Delta^2\cos\varphi_G,\quad F^{(4c)}=-3E_1\Delta^4-3\,|G|\,\Delta^2\sin\varphi_G \tag{9}$$

следует, что для реализации упаковки, близкой к $3c$ (в которой присутствуют элементы как утроения, так и учетверения периода), необходимо выполнение неравенств

$$45^\circ<\varphi_G<75^\circ,\quad {}^3/_2\,|G|\left[\cos\varphi_G+(2-\sqrt{3})\sin\varphi_G\right]>3E_1\Delta^2-|D_0|\,\Delta. \tag{10}$$

Поскольку структура, близкая к утроению периода, в $1T$-VSe_2 существует в широком интервале температур ниже ФП, причем ширина рентгеновского пика слабо зависит от температуры, то такая структура может быть обусловлена конкуренцией упаковок $3c$ и $4c$, а это в свою очередь может быть, если межслойная энергия больше зависящих от фазы членов однослойной энергии.

2. Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей

При вычислении интенсивности рассеяния будем исходить из общего выражения

$$I = |A|^2 = \left| \int d\mathbf{r} \, (\rho_0 + \Delta\rho) \exp\left[2\pi i \mathbf{G} (\mathbf{r} + \mathbf{u})\right] \right|^2, \tag{11}$$

где A — амплитуда рассеяния; $\mathbf{G} = (\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)/\lambda$ — вектор рассеяния, $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q}_0$ — единичные векторы в направлении падающего и отраженного пучков, λ — длина волны; ρ_0 — электронная плотность в нормальной фазе; $\Delta\rho(\mathbf{r}) = \Delta \sum_l \delta(z - l) \sum_j \cos(\mathbf{q}_j \boldsymbol{\rho} + \theta_{j,\,l})$ — ее изменение вследствие ВЗП [4], $\mathbf{q}_j$ и $\boldsymbol{\rho}$ — векторы сверхструктуры и двумерный вектор в плоскости слоя, $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + t\mathbf{z}$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}) \sim \nabla(\Delta\rho(\mathbf{r}))$ — обусловленная ВЗП деформация решетки.

Если учесть, что амплитуды Δ и u малы, то можно при вычислении амплитуды рассеяния пренебречь членами 2-го порядка. Тогда после громоздких вычислений получим

$$I = \frac{1}{N} \sum_{l,\, l'} F_l F_{l'}^{*} \exp\left[2\pi i G_3 (l - l')\right]. \tag{12}$$

Здесь N — число элементарных ячеек, F_l — структурный фактор рассеяния слоем l

$$F_l(\mathbf{G}) = F_0(\mathbf{G}) + \pi\eta N_m B_l(\mathbf{G}), \tag{13}$$

где

$$F_0(\mathbf{G}) = N_m \{f_0 + f_1 [\exp[i\pi(^2/_3 (G_1 + G_2) - G_3)] + \exp[i\pi(^4/_3 (G_1 + G_2) + G_3)]]\} \times \\ \times \delta(G_1 - H)\, \delta(G_2 - K) \tag{14}$$

соответствует нормальной фазе; N_m — число ячеек в слое; f_0, f_1 — атомные факторы рассеяния соответственно для ванадия и селена; $\mathbf{G} = G_1\mathbf{b}_1 + G_2\mathbf{b}_2 + G_3\mathbf{b}_3$; $\mathbf{b}_i$ — векторы обратной решетки в $1T$-структуре; H, K — целые числа; $\eta = u_0/a\sqrt{3}$; u_0 — амплитуда волны смещений,

$$B_l(\mathbf{G}) = \bar{f} \{(H + K - {}^1/_2)\, \delta(G_1 - H + {}^1/_4)\, \delta(G_2 - K + {}^1/_4) \exp(-i\theta_{3,\,l}) - \\ - (H + K + {}^1/_2)\, \delta(G_1 - H - {}^1/_4)\, \delta(G_2 - K - {}^1/_4) \exp(i\theta_{3,\,l}) + \\ + [(2K - H - {}^1/_2)\, \delta(G_2 - K + {}^1/_4) \exp(i\theta_{2,\,l}) - (2K - H + {}^1/_2)\, \delta(G_2 - K - {}^1/_4) \times \\ \times \exp(-i\theta_{2,\,l})]\, \delta(G_1 - H) + [(2H - K - {}^1/_2)\, \delta(G_1 - H + {}^1/_4) \exp(i\theta_{1,\,l}) - \\ (2H - K + {}^1/_2)\, \delta(G_1 - H - {}^1/_4) \exp(-i\theta_{1,\,l})]\, \delta(G_2 - K)\}, \tag{14'}$$

$$\bar{f} = f_0 + 2f_1 \cos[2\pi/3 \cdot (H + K) - \pi G_3].$$

Для направлений $[2 \pm 0.25;\ 0;\ G_3]^*$ в обратной решетке, вдоль которых в [2] измерялось диффузное рассеяние, выражение для интенсивности, приходящейся на одну ячейку, примет простой вид

$$I/N = \mathcal{J}(2 \pm {}^1/_4;\ 0;\ G_3) = \mathcal{J}_0^{\pm} \tilde{f}^2 Y^{\pm}(G_3), \qquad \tilde{f} = \bar{f}/f_0, \tag{15}$$

$$\mathcal{J}_0^{\pm} = \left[\pi\eta f_0 \left(4 \pm \frac{1}{2}\right)\right]^2 N_m, \qquad Y^{\pm} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} K_l^{\pm} \exp(2\pi i G_3 l), \quad K_l^{\pm} = \langle \exp[\mp i (\theta_{1,\,l} - \theta_{1,\,l})] \rangle. \tag{16}$$

Усреднение в корреляционном факторе (16) проводится по различным конфигурациям распределения фаз одной из ВЗП. Если такое распределение, как в нашем случае, образует марковскую цепочку, то остается провести усреднение по всевозможным упаковкам слоев с номерами $l=0$ и $l=1$.

Проиллюстрируем вычисление интенсивности на примере структуры типа $AA\ldots$ с векторами упаковки $\mathbf{r}_{11}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{12}^{(0)}$, $\mathbf{r}_{21}^{(0)}$. Пусть вероятность $\Delta\theta_{1,l}=\pi$ равна β, а $\Delta\theta_{1,l}=\pi/2-(1-\beta)$. Тогда, например, для направления $[2-0.25;\ 0;\ G_3]^*$ имеем

$$K_l^- = a_1^l, \quad a_1=(1-\beta)\exp(-\pi i/2)+\beta\exp(-\pi i)\equiv r\exp(-2\pi i G_m^-).$$

Формула для интенсивности

$$Y^-(G_3)=(1-r^2)/[1+r^2-2r\cos 2\pi(G_3-G_m^-)], \tag{17}$$

где

$$r=(\beta^2+(1-\beta)^2)^{1/2}, \quad G_m^{\pm}=0.5\,(1\pm\pi^{-1}\arccos(\beta/r)).$$

При $\beta=1/3$, что соответствует равновероятным упаковкам, максимум $Y_{\max}^-=(1+r)/(1-r)$ приходится на $G_m^-=0.324$, причем ширина его на полувысоте пика $w=1/\pi\cdot\arccos\,(4r-r^2-1)/2r$ равна 0.094. На рис. 2 приведен график зависимости w от G_m (кривая *1*). Варьируя параметр β, мы можем получить наблюдаемое на эксперименте положение пика, однако ширина его оказывается на порядок больше.

Если учесть тот факт, что взаимодействие $F_{l,\,l+2}$ способствует утроению периода вдоль оси c, и рассмотреть упорядоченное расположение упаковок с разностью фаз $\Delta\theta_{1,l}=\pi/2$, $\pi/2$, π $(\pi/2)$, где в скобках указан сдвиг фаз для ошибки в упаковке, приводящей к учетверению, вероятность которой обозначим через β, то получим

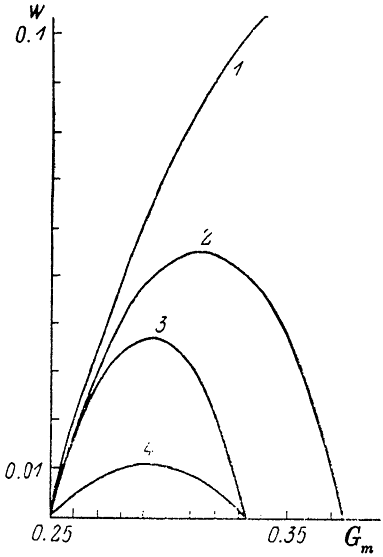

Рис. 2. Зависимость ширины w от положения максимума рентгеновского пика G_m для упаковок типа $AA\ldots$ (*1*) и $AB\ldots$ (*2*), типа $AA\ldots$ с утроением периода и ошибками, приводящими к учетверению (*3*), и для упаковок, обусловленных конкуренцией структур 3*c* и 4*c* (*4*).

$$K_l^- = a_2 b_2^2 K_{l-3}^-, \quad K_1^- = {}^1/_3\,(a_2+2b_2), \quad K_2^- = {}^1/_3\,(2a_2+b_2)\,b_2,$$
$$a_2=(1-\beta)\exp(-\pi i)+\beta\exp(-\pi i/2), \quad b_2=\exp(-\pi i/2). \tag{18}$$

При учете (18) формула для интенсивности принимает вид

$$Y^-(G_3)=\frac{1}{3}\,\frac{(1-r^2)(1+2\sin 2\pi G_3)^2}{[1+r^2-2r\cos 6\pi(G_3-G_m^-)]},$$
$$G_m^-=\frac{1}{3}\left(1-\frac{1}{2\pi}\arccos\left(\frac{1-\beta}{r}\right)\right). \tag{19}$$

На рис. 2, *3* приведена зависимость ширины пика от положения G_m. Она существенно ýже, чем в предыдущем случае, но еще в 3 раза шире экспериментальной.

Рассмотрение упаковок типа (а) и (б) также приводит к результатам, противоречащим эксперименту: упаковка типа $ABBA\ldots$ (а) дает $G_m=1/3$, а для $ABAB\ldots$ (б) получаем $G_m=0.338$ вместо 0.314. На рис. 2, *2* приведен график зависимости w от G_m для упаковок $ABAB\ldots$

$$K_l^- = a_3 b_3 K_{l-2}^-, \quad a_3=\exp(-2\pi i/3),$$
$$b_3=(1-\beta)\exp(-5\pi i/6)+\beta\exp(-\pi i/3).$$

При укладке слоев $ABC\ldots$ (в) с ошибками типа BA и BB не происходит смещения экстрарефлекса из соизмеримого положения, равного 1/3. Таким образом, из рассмотрения всех перечисленных структур следует, что данные по дифракции в $1T$-VSe_2 не могут быть объяснены, если считать энергию межслойного взаимодействия малой.

Если $|F_{l,l+1}| > F_\theta$ и справедливы неравенства (10), то при упаковке слоев будут конкурировать структуры с утроением (в) и учетверением (д) периода. Обозначим через $(1-\beta)$ вероятность $\Delta\theta_{j,l}=2\pi/3$ и β — вероятность $\Delta\theta_{j,l}=\pi/2$. Тогда

$$K_l^- = a_4^l,\quad a_4=(1-\beta)\exp(-2\pi i/3)+\beta\exp(-\pi i/2)$$

и интенсивность рассеяния будет описываться формулой (17), в которой следует произвести замену

$$r\to r_4=\frac{1}{2}\left[(1-\beta)^2+(\sqrt{3}+\beta)^2\right]^{1/2},$$

$$G_m^{\pm}=\frac{1}{2}\left[1\pm\frac{1}{\pi}\arccos\left((1-\beta)/r_4\right)\right]. \tag{20}$$

При изменении β от 0.25 до 0.32 максимум интенсивности сдвигается из положения 0.314 до 0.307, причем w изменяется от 0.008 до 0.0094

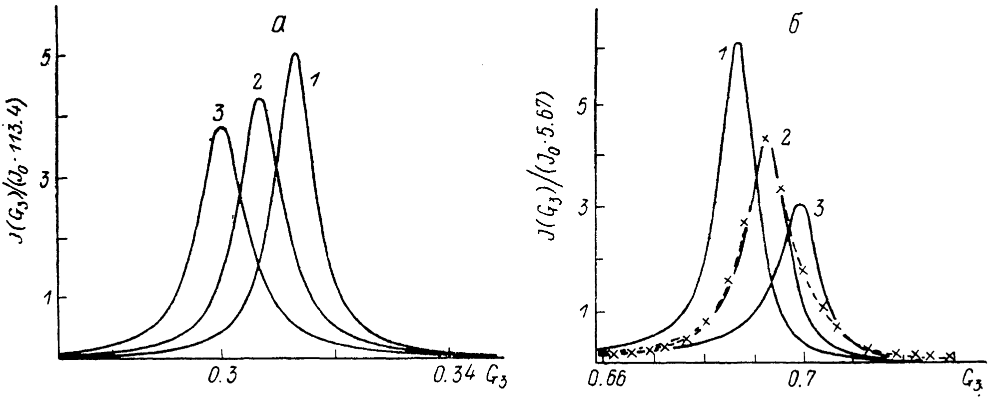

Рис. 3. Формы линий рентгеновских пиков в направлении $[1.75;\ 0;\ G_3]^*$ (*а*) и $[2.25;\ 0;\ G_3]^*$ (*б*). $\beta=0.25$ (*1*), 0.32 (*2*), 0.4 (*3*).

(рис. 2, кривая *4*). Так как $G_m^-\sim 0.3$ для направления $[1.75;\ 0;\ G_3]^*$ и $G_m^+\sim 0.7$ для $[2.25;\ 0;\ G_3]^*$, то угол φ_a действительно находится в первой области углов. Следовательно, структура с утроением периода (в), в которой имеется большая вероятность (~ 0.25) ошибок, приводящих к учетверению периода, является наиболее приемлемой для описания упаковки слоев в $3q$-фазе $1T$-VSe_2.

На рис. 3 приведены зависимости величины $\mathcal{J}^+/\mathcal{J}_0$ для направлений $[2.25;\ 0;\ G_3]^*$ (*а*) и $[1.75;\ 0;\ G_3]^*$ (*б*). Для $\beta=0.32$ амплитуда пика во втором случае оказывается примерно в 20 раз выше, чем в первом. Сравнение теоретической кривой, описывающей форму пика, с экспериментальной (рис. 3, *б*, кривая *2* и штриховая линия) показывает хорошее совпадение как по ширине, так и по форме линии.

Аналогичный вывод можно сделать и после анализа возможных упаковок слоев ВЗП в $2q$-фазе. Однако вероятность сдвига фаз $\Delta\theta=\pi/2$ при ошибке в упаковке типа учетверения должна быть больше (~ 0.32), чтобы получить наблюдаемое значение $G_m^-=0.307$. Это можно понять из энергетических соображений, если учесть, что, согласно (5), (7) и (9), разность энергий структур в $2q$-фазе

$$(F_{2q}^{(4c)}-F_{2q}^{(3c)})=(F_{3q}^{(4c)}-F_{3q}^{(3c)})-({}^3/_2E_1\Delta_{3q}^4+|D_0|\Delta_{3q}^3)$$

меньше, чем соответствующая разность в $3q$-фазе. Следовательно, вероятность этих ошибок в $2q$-фазе должна быть большей. Принципиальным отличием картины рассеяния в $3q$- и $2q$-фазах является то, что максимумы, соответствующие одной из ВЗП в $2q$-фазе, должны погасать. Поэтому для более точного установления ФП $3q \rightarrow 2q$ необходимы измерения интенсивности рассеяния и в других направлениях обратной решетки: $[0;\ K\pm0.25;\ G_3]^*$, $[H\pm0.25;\ K\pm0.25;\ G_3]^*$.

Таким образом, сравнение интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей, вычисленной в различных моделях беспорядка при упаковке слоев в $1T$-VSe_2, с данными дифракционных экспериментов позволило установить модель структуры (локально-соизмеримая упаковка слоев с утроением и учетверением периода вдоль оси c) и сделать вывод о том, что межслойное взаимодействие в этих соединениях больше зависящей от фаз ВЗП части однослойной энергии. Для изучения ФП $3q \rightarrow 2q$, а также более адекватного сравнения развитой здесь теории с экспериментальными данными необходимо проведение более полных рентгеновских исследований.

Список литературы

[1] Tsutsumi K., Sambongi T., Toriumi A., Tanaka S. J. // J. Phys. Soc. Jap. 1980. V. 49. N 2. P. 837—838.
[2] Tsutsumi K. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 2. P. 5756—5759.
[3] Eaglesham D. J., Withers R. L., Bird D. M. // J. Phys. C. 1986. V. 19. N 3. P. 359—367.
[4] Кулеев И. Г., Кондратьев В. В., Скрипов А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2264—2272.
[5] Кулеев И. Г., Кондратьев В. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. N 3.
[6] Walker M. B., Jacobs A. E. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. N 7. P. 4856—4870.
[7] Walker M. B., Withers R. L. // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. N 5. P. 2766—2774.
[8] Shiba H., Nakanishi K. // Tech. Rep. ISSP. 1985. Ser. A. N 1555. 166 p.
[9] McMillan W. L. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 4. P. 1496—1504.
[10] Гинье А. Рентгенография кристаллов. М.: Физматгиз, 1961. 604 с.

Институт физики металлов
УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
2 июня 1989 г.