

## РЕНТГЕНОЭМИССИОННЫЕ СПЕКТРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ ПРУСТИТА

Я. О. Довгий, И. В. Китык, И. Г. Маньковская

В последнее время наблюдается повышенный интерес к монокристаллам прустита  $\text{Ag}_3\text{AsS}_3$  (пр. гр.  $C_{3v}^6$ ), в которых обнаружен ряд интересных свойств, обусловленных особенностями их зонной структуры [1-3]. Од-

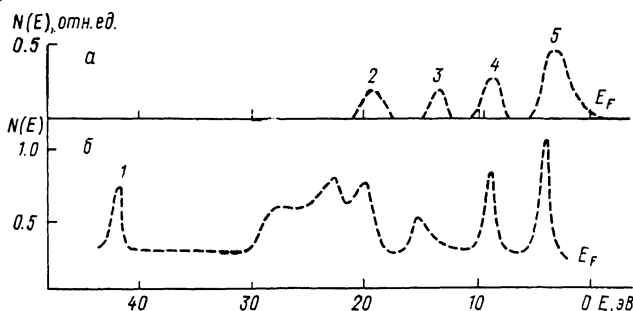


Рис. 1. Распределение плотности валентных электронов в монокристаллах прустита: а — теоретический расчет, б — экспериментальные спектры РЭС. 1 —  $3d_{\text{Ag}}$ ; 2 —  $4d_{\text{Ag}}$ ,  $3s_{\text{S}}$ ; 3 —  $4s_{\text{Ag}}$ ; 4 —  $4p_{\text{As}}$ ; 5 —  $3p_{\text{S}}$ .

нако, к сожалению, на сегодняшний день нет сколько-нибудь надежных данных о строении их зонной структуры. Полученные в [4] оптические

спектры в области фундаментального поглощения дают информацию о межзонных интервалах между валентной зоной и зоной проводимости. В то же время, исходя из них, трудно получить представление о строении валентной зоны. А это очень важно не только для самого прустита, но и для всех аналогов тройных халькогенидов, которых на сегодняшний день насчитывается более 70.

Целью данной работы является построение количественных зонных диаграмм монокристаллов прустита. Для этого нами использован комплексный подход, который учитывает, с одной стороны, расчеты методом сильной связи, а с другой — корректировку соответствующих зонных параметров по рентге-

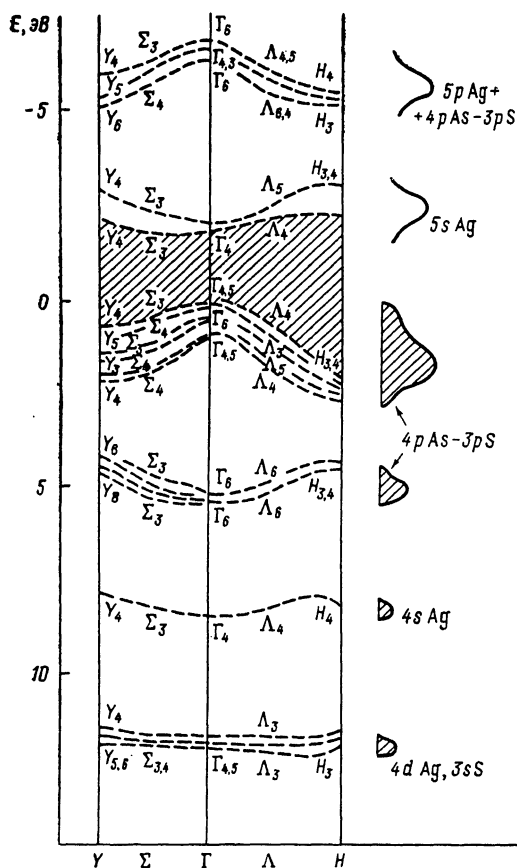


Рис. 2. Зонная структура монокристаллов прустита.

Обозначения симметричных точек зоны Бриллюэна общепринятые (см., например, [5]).

ноэмиссионным данным, а также по полученным ранее оптическим спектрам в глубине фундаментального поглощения [4].

Исследуемые монокристаллы были выращены по методике, описанной в [5]. Их размеры составляли  $1.5 \times 1.5 \times 2$  см. Измерения рентгеновских эмиссионных спектров (РЭС) проводились на рентгеновском спектрометре РСМ-500. Кроме того, проводился дополнительный контроль фотоэмиссионных спектров (ФЭС) на спектрометре «Хюллерд—Паккард».

На рис. 1, б приведены полученные спектры РЭС для монокристаллов прустита. Для удобства сравнения с теоретическими расчетами отсчет ведется относительно уровня Ферми. Теоретические расчеты велись методом линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО). При этом использовалась полуэмпирическая методика, подробно описанная в [6, 7]. В качестве базисных выбирались следующие кластеры: триады  $AsS_3$ , цепочки  $S—Ag—S$ . Действие остальных атомов до пятой координационной сферы включительно учитывалось по теории возмущений. Экранировка осуществлялась по Слэтеру с учетом пуассоновских поправок. Расчеты проводились в 56 точках неприводимой части зоны Бриллюэна. Результаты такого расчета приведены на рис. 2. Из рис. 1 видно, что для базисных орбиталей, какими являлись  $4pAs$ ,  $3pS$ ,  $3sS$ ,  $4s$ ,  $5s$ ,  $4dAg$  блоховские суммы, получено удовлетворительное согласие со спектрами РЭС. Правда, для  $4sAg$ -зон наблюдается расхождение между экспериментом и теорией до 1 эВ. РЭС-спектры дали нам информацию о структуре более низких зон, что важно для более полного зонного расчета. Некоторое отличие с теоретическими расчетами связано, по-видимому, с некоторыми особенностями РЭС-метода.

Полученные РЭС-спектры показывают на эффективность комплексного подхода при построении зонной структуры сложных кристаллов. Эти данные могут быть использованы при построении количественных зонных параметров для других изоструктурных халькогенидов.

Авторы выражают благодарность М. Д. Костикову за помощь при проведении измерений.

#### Список литературы

- [1] Абдикамалов Б. А., Иванов В. И., Шехтман И. М. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 10. С. 2963—2968.
- [2] Злоказов В. Б., Кобелев Л. Я., Карпачев С. В. // ДАН СССР. 1981. Т. 259. № 2. С. 344—347.
- [3] Довгий Я. О., Китык И. В., Колобанов В. Н., Михайлин В. В., Махов В. Н., Луга П. П. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 1. С. 302—304.
- [4] Довгий Я. О., Китык И. В. // Опт. и спектр. 1988. Т. 65. № 2. С. 329—334.
- [5] Сложные халькогениды и халькогалогениды, получение и свойства / Под ред. Д. В. Чепура. Львов, 1983. 180 с.
- [6] Бурак Я. В., Довгий Я. О., Китык И. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 9. С. 275—278.
- [7] Довгий Я. О., Китык И. В., Дьяков В. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 9—13.
- [8] Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп: Справочное руководство. М., 1986. 368 с.

Львовский государственный университет  
им. Ив. Франко

Поступило в Редакцию  
4 января 1990 г.  
В окончательной редакции  
4 мая 1990 г.

УДК 535.37

© Физика твердого тела, том 32, № 10, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 10, 1990

## ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ОСТОВНО-ВАЛЕНТНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КРИСТАЛЛЕ $RbCaF_3$

П. А. Родный, М. А. Терехин, С. В. Петров

Новый вид собственного свечения ионных кристаллов, связанного с переходами между верхней остовной и валентной зонами, активно исследуется в последнее время как в научном [1-3], так и в прикладном [4] аспектах. Излучательные остовно-валентные переходы (ОВП) эффективны