

Изучение смешанных валентных состояний в кристалле лантан галлиевого силиката

Орешко А.П.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия

e-mail: oreshko@mail.ru

Овчинникова Е.Н.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия

e-mail: ovtchin@gmail.com

Милль Б.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия

e-mail: mill@plms.phys.msu.ru

Рогалев А.

European Synchrotron Radiation Facility, 71, avenue des Martyrs, Grenoble, 38043, France

e-mail: rogalev@esrf.fr

Вильгельм Ф.

European Synchrotron Radiation Facility, 71, avenue des Martyrs, Grenoble, 38043, France

e-mail: wilhelm@esrf.fr

Дмитриенко В.Е.

ИК им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Ленинский пр-т, 59, Москва, 119333, Россия

e-mail: dmitrien@crys.ras.ru

В настоящей работе были исследовано явление рентгеновского естественного кругового дихроизма (*XNCD*) и его структурные причины в кристалле лантан галлиевого силиката $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ при энергии падающего излучения вблизи *K*-края поглощения Ga и $L_{2,3}$ -краев поглощения La.

Эксперимент по наблюдению сигнала *XNCD* в лангасите был выполнен на станции *ID12 ESRF*

Сигнал *XNCD* наблюдался преимущественно за краем поглощения, что подтвердило существование делокализованных смешанных *p-d* электронных состояний Ga и *d-f* и *d-p* электронных состояний La. На всех краях было обнаружено, что сигналы *XNCD* при волновом векторе падающего излучения ориентированном вдоль оси третьего порядка кристалла *c* в два раза больше и противоположны по знаку, чем при ориентации волнового вектора перпендикулярно оси *c*.

Расчеты с применением метода многократного рассеяния позволили разделить вклады от трех кристаллографически неэквивалентных позиций атомов Ga в спектр поглощения и сигнал *XNCD* и дать качественное объяснение, почему наибольший вклад в сигнал *XNCD* дает атом Ga в позиции Уайкова *1a*.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (16-02-00887, 13-02-00760) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ.