

*Письма в ЖЭТФ, том 14, стр. 205 – 209*

*20 августа 1971 г.*

**НАБЛЮДЕНИЕ МАЛЫХ ПОЛЯРОНОВ В  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>,  
С ПОМОЩЬЮ ЭФФЕКТА МЕССБАУЗРА**

*И. А. Дубовец, Ф. А. Сидоренко*

Полупроводниковая природа низкотемпературной модификации высшего силицида железа ( $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>) изучалась в серии работ [1 – 5]. Ширина запрещенной зоны в его энергетическом спектре составляет  $\sim 0,9$  эв. Примесная проводимость и оптическое поглощение  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>, легированного кобальтом (*n*-тип), интерпретированы в модели малых поляронов [2, 5].

Кристаллическая структура  $\beta\text{-FeSi}_2$  определена в работе [6]:  $Cmc_2$ , ромбическая решетка,  $a = 9,763 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,797 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,833 \text{ \AA}$ , атомы Fe занимают позиции  $8d$  и  $8f$ , а атомы Si-позиции  $16g$  с двумя наборами структурных параметров. Однако в работе [7], приводятся иные данные о пространственной группе рассматриваемого силицида.

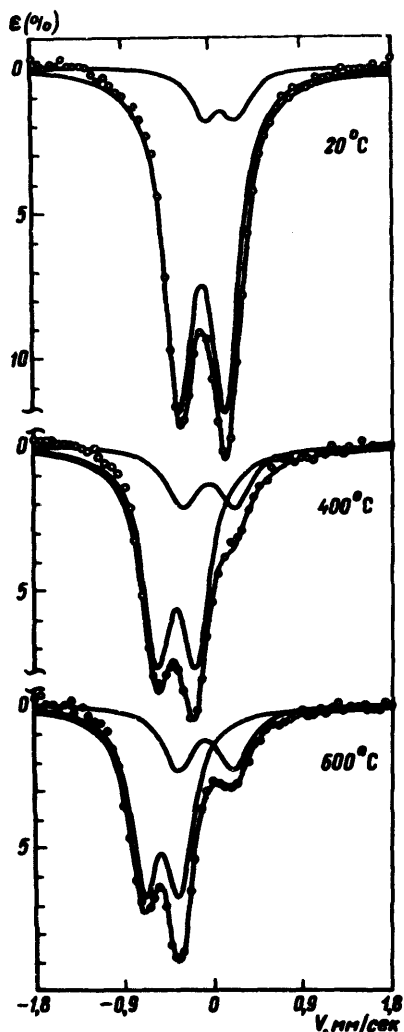


Рис. 1. Мессбауэровские спектры  $\text{Fe}^{57}$  в  $\beta\text{-FeSi}_2$  при разных температурах

Мессбауэровский спектр  $\text{Fe}^{57}$  в  $\beta\text{-FeSi}_2$  [8] изучался ранее, при температурах кипения азота и комнатной.

Для получения новой информации об электронном строении  $\beta\text{-FeSi}_2$  нами изучался эффект Мессбауэра в области температур от  $-196$  до  $600^\circ\text{C}$ . Образцы были приготовлены прямым сплавлением высоко чистых компонентов в герметичной высокочастотной печи. Полученный сплав отжигался при  $940^\circ\text{C}$  в течении  $100 \text{ час}$ . Металлографический и рентгенографический анализы подтвердили полную однофазность препарата.

Мессбауэровский поглотитель приготовлялся осаждением из спиртовой суспензии порошка  $\beta\text{-FeSi}_2$ , на бериллиевый диск. Толщина пог-

лотителя равнялась  $15 \text{ мг/см}^2$ . Источником излучения служил  $\text{Co}^{57}$ , введенный в Pd. Спектры обрабатывались на ЭВМ "Мир" в предположении лоренцевской формы линии.

На рис. 1 приведены мессбауэровские спектры  $\beta\text{-FeSi}_2$  при трех температурах. При комнатной температуре линия поглощения представляет собой почти симметричный дублет. С повышением температуры спектр принимает несимметричный вид, что связано с переходом части атомов железа в другие электронные состояния, характеризующиеся иными величинами квадрупольных расщеплений и изомерных сдвигов. На рисунке показано простейшее разложение спектра на две пары линий с квадрупольным расщеплением.

Площадь под линией, соответствующей новым состояниям железа, линейно зависит от  $\exp(-q/kT)$ , что видно из рис. 2, и достигает  $\sim 30\%$  общей площади спектра при  $600^\circ\text{C}$ .

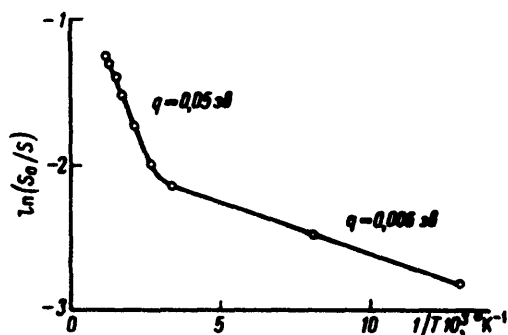


Рис. 2. Зависимость относительной площади дополнительной линии мессбауэровского поглощения, возникающей при повышении температуры, от  $T^{-1}$

Представляется вероятной следующая интерпретация полученных данных. Появление новой линии в мессбауэровском спектре при повышении температуры свидетельствует о рождении новых электронных состояний, не принадлежащих всему кристаллу, а локализованных вблизи части атомов на время, существенно превышающее время взаимодействия  $\gamma$ -квантов ядрами  $\text{Fe}^{57}$ . Доля ядер, вблизи которых изменяется состояние электронов, сравнительно велика (порядка 30% при  $600^\circ\text{C}$ ), что заставляет связывать возбуждаемые локализованные состояния с основными атомами матрицы, а не с атомами возможных малых примесей. Заманчиво отождествить наблюдаемые локализованные состояния с малыми поляронами двух типов с характерными энергиями рождения 0,006 и 0,05 эВ. Значение  $q = 0,05 \text{ эВ}$  оказывается совпадающим с положением острого максимума в спектре ИК поглощения  $\beta\text{-FeSi}_2$  [5]; температура, соответствующая особой точке на рис. 2, примерно совпадает с температурой излома на графике  $\ln \sigma - T^{-1}$  [2] и отношение энергий активации в обоих случаях одинаковое.

Если обнаруженные локальные состояния действительно являются малыми поляронами, то, судя по величинам  $q$  и значениям квадрупольных расщеплений, их радиус необычно мал и сравним с радиусом атома.

## Литература

- [ 1 ] А.И.Гольдберг, В.А.Липатова, П.В.Гельд. Изв. Выш. уч. зав., Сер. Черная металлургия, №4, 121, 1957.
  - [ 2 ] U.Birkholz, J. Schelm. Phys. stat. sol, 27, 413, 1968.
  - [ 3 ] U.Birkholz, H.Finkenrath, J.Naegele, N.Uhle. Phys. stat. sol. 30, K81, 1968.
  - [ 4 ] U.Birkholz, A.Fruhauf. Phys. stat. sol. 34, K181, 1969.
  - [ 5 ] U.Birkholz, J. Naegele. Phys. stat. sol. 39, 197, 1970.
  - [ 6 ] R.Wandji, Y.Dusausoy, J.Protas, B.Roques. C.r.Acad. Sci, C269, 907, 1969.
  - [ 7 ] R.Bucksch. Z.Naturforsch. 22a, 2124, 1967.
  - [ 8 ] R.Wäppling, L.Häggström, S.Rundqvist. Chem,Phys. Lett., 2, 160, 1968.
-