

# Рентгеновский естественный круговой дихроизм в кристалле CsCuCl<sub>3</sub>

*Козловская Ксения Александровна*

*аспирант*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: xen@ok.ru*

## Введение

С появлением третьего поколения источников синхротронного излучения стало возможно создание интенсивного рентгеновского кругополяризованного излучения, а с ним и изучение явлений рентгеновской оптической активности (ХОА), в том числе рентгеновского естественного кругового дихроизма (XNCD) [1]. Впервые явление естественного кругового дихроизма (XNCD) в рентгеновском диапазоне наблюдалось в эксперименте в 1997 году в области XANES при исследовании энантиоморфных кристаллов Na<sub>3</sub>Nd(digly)<sub>3</sub>\*2NaBF<sub>4</sub>\*6H<sub>2</sub>O в области L<sub>3</sub>-края Nd, и с тех пор было обнаружено в ряде других структур [1]. Теоретические исследования показали, что естественная оптическая активность связана с переходами, в которых смешиваются мультипольные моменты с противоположной четностью E1E2 [2].

Настоящая работа посвящена теоретическому рассмотрению рентгеновского естественного кругового дихроизма в кристалле CsCuCl<sub>3</sub> в области K-края Cu, численному моделированию спектра дихроизма и его сопоставлению с экспериментальными данными, полученными на Европейском источнике синхротронного излучения группой А.Рогалева. При комнатной температуре гексагональный перовскит CsCuCl<sub>3</sub> может существовать в виде одного из двух зеркальных изомеров с симметрией P6<sub>1</sub>22 или P6<sub>5</sub>22, которым соответствуют противоположные знаки сигнала дихроизма. Целью эксперимента было установление конкретного вида энантиоморфной модификации образца.

Было проведено численное моделирование спектров поглощения, а также спектра кругового дихроизма в кристалле CsCuCl<sub>3</sub> с использованием программ FEFF8, FDMNES и LMTO. Были выполнены расчеты с использованием трех видов обменно-корреляционного потенциала для кластеров размером 9.7 Å и 11.5 Å. Поскольку в сигнал кругового дихроизма пропорционален мнимой части компоненты антисимметричного тензора третьего ранга, отвечающего диполь-квадрупольному переходу, были произведены расчеты этой компоненты тензора в зависимости от энергии падающего излучения. Существование сигнала естественного кругового дихроизма в предкраевой области K-края меди свидетельствует о существовании плотности p-d смешанных состояний в этой области [2]. Все выполненные расчеты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными и свидетельствуют о том, что экспериментально исследованный образец имел симметрию P6<sub>1</sub>22.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 05-02-16-770. Автор выражает благодарность А.Рогалеву, В.Е.Дмитриенко, А.Ф.Константиновой, Е.Н.Овчинниковой и А.М.Колчинской.

## Литература

1. X-ray Optical Activity: Applications of Sum Rules J. Goulon, A. Rogalev, F. Wilhelm, C. Goulon-Ginet, P. Carra, I. Marri, and Ch. Brouder Journal of Experimental and Theoretical Physics, Vol. 97, No. 2, 2003, pp. 402-431.
2. Calculation of X-ray natural circular dichroism; C.R. Natoli, Ch. Brouder, Ph. Sainctavit, J. Goulon, Ch. Goulon-Ginet, and A. Rogalev Eur. Phys. J. B 4, 1 (1998)