

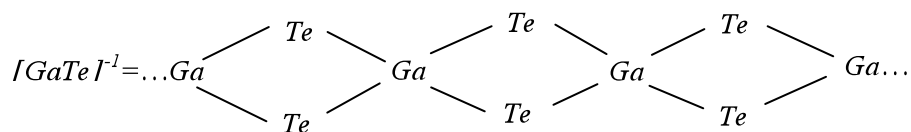
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ
TlGaTe₂ НА ОСНОВЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

Э.М.ГОДЖАЕВ, Д.М.КАФАРОВА, Г.С.ОРУДЖЕВ
Азербайджанский Технический Университет

В работе проведен расчет оптических констант (эффективная диэлектрическая проницаемость, мнимая и реальная части коэффициента преломления и оптической электропроводности и т.д.) на основе зонной структуры при поляризациях параллельной и перпендикулярной оптической оси с. Наши теоретические данные очень хорошо согласуются с экспериментальными.

Структурные исследования тройного соединения *TlGaTe₂* показывают, что данная фаза является структурным аналогом *TlSe* и кристаллизуется в тетрагональной сингонии с параметрами решетки $a = 8,37 \text{ \AA}$, $c = 7,80 \text{ \AA}$, пространственная группа симметрии $D_{4h}^{18} (I4/mcm)$ [1].

Сопоставление полученных данных показывает, что аналогично *TlSe* связь *Tl-Te* в восьмивершиннике соответствует ионной, в то время как длина связи в *Ga-Te* совпадает с суммой ковалентных радиусов *Ga-Te* в тетраэдрах, что свидетельствует о ковалентной связи между ними. Исходя из распределения металлических атомов реальных межатомных расстояний в структуре *TlGaTe₂*, следует записать формулу данного соединения в виде $Tl^{1+} [Ga^{3+}Te_2]^{1-}$, т.е. $[GaTe_2]^{1-}$ в кристаллической решетке выступает как самостоятельная анионная группа и ее структурная формула записывается следующим образом



В работе [2] проведен расчет зонной структуры соединения *TlGaTe₂* методом псевдопотенциала и определены происхождения валентной зоны и зоны проводимости. Ширина запрещенной зоны определенная по зонной структуре, хорошо согласуется с экспериментальными данными и составляет ~0,86 эВ. Нелокальные ионные псевдопотенциалы в конфигурационном пространстве строились по схеме, предложенной в работе [3]. При расчете зонной структуры данного соединения экранирование ионного заряда, а также обменно-корреля-

ционные эффекты учитывались в рамках диэлектрического формализма по модели Хаббарда-Шэма с некоторым выборочным распределением заряда вокруг каждого иона. Использовано около 1800 плоских волн в разложении волновой функции. При этом максимальная кинетическая энергия учитываемых плоских волн составляло 16 Rydb.

Оптические свойства $TlGaTe_2$ изучены недостаточно. В связи с этим нашей целью являлось теоретическое исследование некоторых оптических свойств данного соединения на основе его зонной структуры. Были проведены расчеты мнимой и реальной частей комплексной диэлектрической проницаемости, а также эффективного числа валентных электронов при поляризациях параллельной и перпендикулярной оптической оси [2]. На основе результатов вышеуказанных параметров были определены основные оптические параметры данной фазы.

Главный показатель преломления (вещественная часть показателя преломления) определялся по формуле [4]

$$n = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\epsilon_r + \sqrt{\epsilon_r^2 + \epsilon_i^2} \right)},$$

где ϵ_r, ϵ_i -реальная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости, соответственно. На рис.1(а)(где- 1- $e||c$ и 2- $e\perp c$) представлена энергетическая зависимость главного показателя преломления. При $e||c$ зависимость $n(E)$ начинается со значения $n(0)=3,6$ и достигает максимума при энергии 1,85 эВ (4,56), затем слабый минимум при энергии 2,28эВ (4,39) и снова небольшой пик при энергии 2,50 эВ (4,42), дальнейший спад зависимости $n(E)$ до значения энергии равной 4,68эВ (1,12), что соответствует ярко выраженному минимуму. При $E > 4$ эВ коэффициент преломления монотонно уменьшается. Что касается $e\perp c$ поляризации, то здесь сначала проявляется ярко выраженный пик при 1,19 эВ (4,02), затем слабый минимум при 1,85 эВ (3,69) и снова, но небольшой максимум при энергии 2,28 эВ (3,73), слабый минимум при 3,15 эВ (2,60) и ярко выраженный минимум при энергии 4,68 эВ (1,12) и не считая небольшого пика при 4,89 эВ (1,45) так же как и при $e||c$ наступает монотонное уменьшение коэффициента преломления.

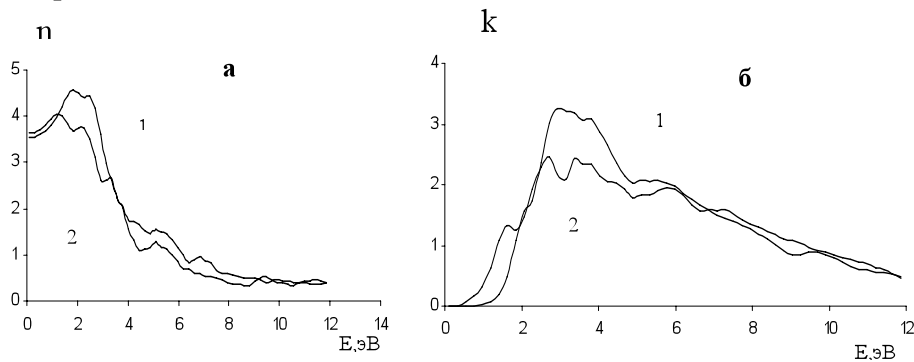


Рис. 1. Спектральная зависимость реальной (а) и мнимой (б) частей коэффициен-

та преломления соединения $TlGaTe_2$

Мнимая часть коэффициента преломления определяется следующим образом,

$$k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \right)}.$$

На рис. 1(б) представлена спектральная зависимость мнимой части коэффициента преломления соединения $TlGaTe_2$. Для $e||c$ поляризации зависимость $k(E)$ начинается с энергии равной 0,76 эВ, затем происходит увеличение мнимой части коэффициента преломления достигая максимума при энергии 2,72 эВ (2,46), затем монотонное уменьшение остальных областей $k(E)$ зависимости. При поляризации $e \perp c$ зависимость $k(E)$ начинается с очень малой энергии равной 0,32 эВ, при 1,63 эВ (1,31) образует плечо и далее увеличиваясь, достигает максимума при энергиях 2,72 эВ (2,46) и 3,37 эВ (2,42), а между максимумами находится минимум 3,15 эВ (2,09), далее зависимость $k(E)$ монотонно уменьшается и никаких заметных структур не наблюдается.

Характеристическая функция потерь энергии электронов определяется таким образом,

$$-I_m \left(\frac{1}{\varepsilon} \right) = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_i^2 + \varepsilon_r^2}.$$

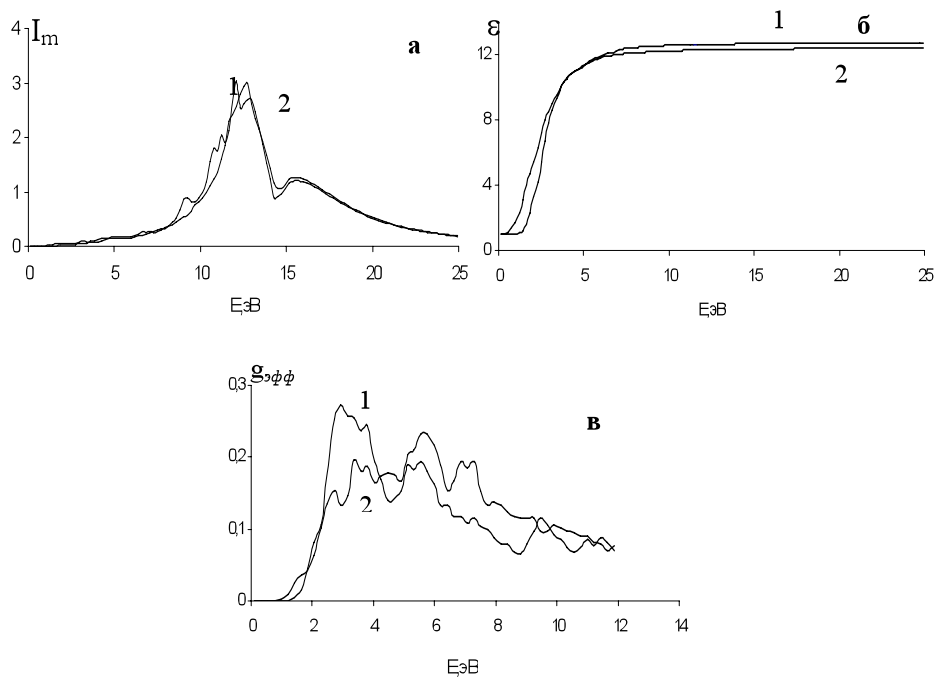


Рис.2. Спектральная зависимость мнимой части обратной величины комплексной диэлектрической проницаемости (а), эффективной диэлектрической проницаемости (б) и

эффективной плотности состояний (в) соединения $TlGaTe_2$

Спектральная характеристика мнимой части обратной величины комплексной диэлектрической проницаемости ($I_m(-\epsilon^{-1})$) представлена на рис.2(а). Отсюда видно, что при поляризации $e\parallel c$ на зависимости наблюдаются два максимума при энергиях 12,08 эВ (3,02) (большой максимум) и 12,95 эВ (2,68) (малый максимум). При $e\perp c$ поляризации ярко выраженный максимум при энергии 12,95 эВ (2,68).

Эффективная диэлектрическая проницаемость, возникшая за счет междузонных оптических переходов, вычисляется с помощью формулы:

$$\epsilon_{\text{эфф}} = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} (\omega')^{-1} \epsilon_i(\omega') d\omega'.$$

Результаты расчета представлены на рис. 2(б).

Эффективная плотность состояний определена формулой

$$g_{\text{эфф}} = \epsilon_i(\hbar\omega)^2,$$

а результаты расчета на рис.2(в).

Реальная и мнимая части оптической электропроводности определяются с помощью следующих формул:

$$\sigma_r = \frac{\omega\epsilon_i}{4\pi}, \quad \sigma_i = -\frac{\omega\epsilon_r}{4\pi}.$$

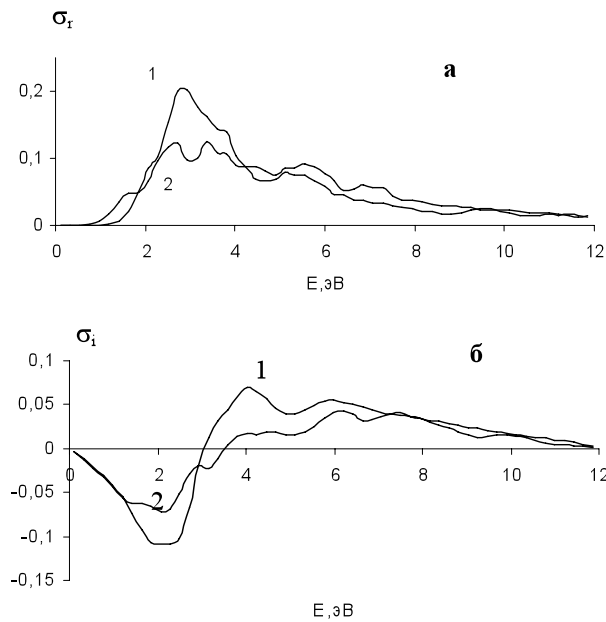


Рис.3. Спектральная зависимость реальной (а) и мнимой части (б) оптической электропроводности соединения $TlGaTe_2$

Зависимость $\sigma_i(E)$ представлены на рис. 3(а), где для $e\parallel c$ поляризации наблюдается ярко выраженный максимум при энергии 2,93 эВ (0,20) и минимум при 4,68 эВ (0,06), затем небольшая структура при 5,78 эВ (0,08) и далее монотонное уменьшение зависимости $\sigma_i(E)$. Для $e\perp c$ поляризации наблюдаются два пика при энергиях 2,72эВ (0,123) и 3,37 эВ (0,12), а между ними находится минимум при энергии 2,93 эВ (0,09). На рис.3(б) представлена зависимость $\sigma_i(E)$. Отсюда видны два ярких минимума при энергиях 2,06эВ (-0,10), 4,89 эВ (0,03) и ярко выраженные максимумы при энергиях 4,02 эВ (0,06), 5,93 эВ (0,05)(для $e\parallel c$). А для $e\perp c$ поляризации, то здесь наблюдается минимум при 2,06 эВ (-0,07), затем небольшое плечо при энергии 3,15 эВ (-0,02) и максимум при 6,20 эВ (0,04) и далее для обеих поляризаций происходит монотонное уменьшение $\sigma_i(E)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hahn H., Weltman B. Über ternäre chalcogenide des Thalliums mit Gallium und Indium // Naturwissenschaften, 1967, v. 54, №2, pp.42.
2. Годжаев Э.М., Оруджев Г.С., Кафарова Д.М. Зонная структура и диэлектрическая проницаемость соединения $TlGaTe_2$ // ФТТ, 2004, том 46, в.5, с. 811-813 (Physics of the solid state, 2004, Vol. 46, №5, pp. 833-835).
3. Bachelet G.B., Hamann D.R., and Schluter M. Pseudopotentials that work: From H to Pu // Phys. Rev., 1982, B26, №8, pp. 4199-4223.
4. Уханов Ю.И. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука, 1977, 366с.

$TlGaTe_2$ BİRLƏŞMƏSİNİN ZONA QURULUŞU ƏSASINDA OPTİK SABİTLƏRİN HESABLANMASI

E.M.QOCAYEV, D.M.QAFAROVA, H.S.ORUCOV

XÜLASƏ

İşdə zona quruluşu əsasında, polyarlaşmanın müxtəlif hallarında ($e\parallel c$ və $e\perp c$) $TlGaTe_2$ birləşməsinin optik sabitləri (effektiv dielektrik nüfuzluğu, sındırma əmsalının və optik elektrik keçiriciliyinin xəyali və həqiqi hissələri və s.) təyin edilmişdir. Bizim nəzəri və eksperimental hesablamalarımız çox yaxşı uzlaşır.

DEFINITION OF THE OPTICAL CONSTANT ON THE BASE OF THE BAND STRUCTURE OF THE $TlGaTe_2$ COMPOUND

E.M.GODZHAEV, D.M.KAFAROVA, G.S.ORUDZHEV

SUMMARY

In the work on the base of band structure of the compound $TlGaTe_2$, optical constant are determined in the case when the polarizations are parallel and perpendicular to the optic axis of the crystal. Our theoretical results are in qualitative agreement with the experimental

data.