

ЗОНЫ И ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ СЕЛЕНИДА ВИСМУТА

Соболев В. В., Крамарь В. М., Козлова С. Г., Темчук Г. И.

Изучены прецизионные спектры отражения сколов селенида висмута в области 1—4.5 эВ при 80 и 293 К.

На основе известных теоретических расчетов зон оценены энергии наиболее актуальных междузонных переходов селенида висмута. Это позволило предложить качественную модель объяснения природы структур известных оптических спектров, особенно прецизионных спектров отражения при 80 и 293 К, по которым рассчитан комплекс оптических функций.

Сильно анизотропные слоистые кристаллы Bi_2Se_3 принадлежат к группе $\text{A}_2\text{B}_3\text{V}_6$, известной своим давним прикладным применением^[1]. Самую обширную информацию об электронной структуре полупроводников дает спектроскопия отражения. Для Bi_2Se_3 при поляризации $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ известны спектры отражения (R) при 80 и 293 К в области 1—12 эВ^[2, 3] и термоотражения (TR) при 120 К в области 1—5 эВ^[4] (табл. 1). Они содержат 18 структур, обычно объясняемых в зонной модели междузонными переходами. Возможность определения конкретной природы каждого максимума отражения появилась только после опубликования первого квазирелятивистского расчета зон Bi_2Se_3 (14 валентных зон V_i и 9 зон проводимости C_j) по всей зоне Бриллюэна методом псевдопотенциала^[5, 6].

Нами на основе правил отбора для переходов при $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ для кристаллов типа Bi_2Se_3 ^[7] были проанализированы результаты расчетов^[6] и определен спектр наиболее интенсивных 16 междузонных переходов A_i между почти параллельными парами зон V_i и C_j в точках направлений зоны Бриллюэна (табл. 2;

Таблица 1
Энергии максимумов R , TR и A_i для $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ Bi_2Se_3

E, эВ	R [°]		R [°]		TR [°] 120 К	A _i [°]
	80 К	293 К	80 К	293 К		
E_1	1.34	1.34	—	—	—	A_1
E_2	1.60	1.59	—	—	(1.78)	A_2
E_3	2.07	—	2.12	—	(2.1)	A_3
E_4	2.22	2.26	2.30	2.25	2.40	
E_5	2.52	2.56	—	—	2.61	A_4
E_6	2.88	2.95	2.85	2.95	2.88	A_5
E_7	2.98	—	—	—	3.10	
E_8	3.37	—	—	—	—	A_6
E_9	3.61	—	—	—	—	A_7
E_{10}	3.69	—	—	—	3.70	
E_{11}	3.78	—	3.75	3.80	—	
E_{12}	3.97	3.92	—	—	—	A_8
E_{13}	4.30	4.18	—	—	4.37	
E_{14}	—	—	—	4.75	—	A_9
E_{15}	—	—	—	7.2	—	A_{11}
E_{16}	—	—	—	8.5	—	A_{12}
E_{17}	—	—	—	9.6	—	A_{13}
E_{18}	—	—	—	9.9	—	

A_i	E , эВ	Природа переходов
A_1	1.1	$V_{14}-C_1 (F), V_{13}-C_2 (\Delta)$
A_2	1.4	$V_{14}-C_1 (\Sigma', R, Q)$
A_3	1.8-2.2	$V_{14}-C_4 (\Delta), V_{13}-C_2 (F, \Delta', S), V_{14}-C_1 (S)$
A_4	2.5-2.8	$V_{11}-C_1, V_{14}-C_4 (\Delta', R)$
A_5	3.0	$V_9-C_1 (\Delta'), V_7-C_1 (\Delta), V_{10}-C_2 (\Delta), V_{14}-C_4 (\Sigma'), V_{14}-C_5 (\Sigma')$
A_6	3.4	V_9-C_1
A_7	3.6	$V_{11}-C_1 (C), V_{13}-C_3 (C, \Delta), V_{11}-C_4 (\Delta)$
A_8	4.0	$V_7-C_1 (\Sigma', S, R), V_{10}-C_2 (C, \Delta', S), V_{12}-C_3 (\Delta)$
		$V_{11}-C_4 (\Sigma', \Delta', S), V_{14}-C_5 (R), V_{11}-C_5 (\Delta)$
A_9	5.0	$V_{10}-C_3 (C, \Delta), V_9-C_4 (\Sigma', C, \Delta), V_{11}-C_5 (\Delta, S)$
A_{10}	6.0	$V_8-C_2 (C, S), V_9-C_4 (C), V_7-C_5 (\Sigma')$
A_{11}	7.5	$V_5-C_1 (\Sigma', R, Q)$
A_{12}	8.0	$V_5-C_1 (C, \Delta', \Delta, S), V_4-C_3 (\Delta')$
A_{13}	10	$V_4-C_2 (\Sigma', R), V_4-C_3 (\Delta'), V_5-C_4 (\Sigma', C, \Delta'), V_5-C_5 (\Sigma', \Delta)$
A_{14}	11.3	V_3-C_1
A_{15}	12.5	V_3-C_4
A_{16}	15.5	V_1-C_1, V_2-C_3

точки направлений приведены в скобках; переходы без указания точек направлений происходят по многим направлениям). Сопоставление расчетных данных табл. 2 с экспериментальными результатами табл. 1 позволяет пока предложить весьма упрощенную модель природы максимумов отражения (см. последний столбец в табл. 1).

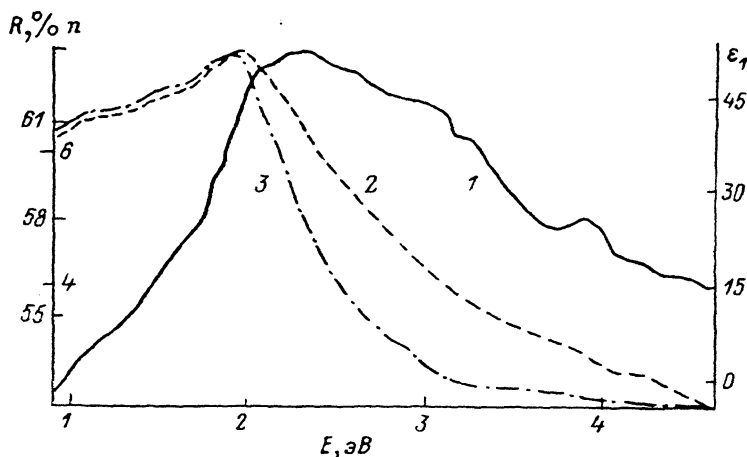


Рис. 1. Экспериментальный спектр отражения R (1) и расчетные функции n (2), ϵ_1 (3) Bi_2Se_3 при $E \perp c$ и 293 К в области 1—4.5 эВ.

Хорошо известно, что наиболее глубокий и детальный анализ зонной структуры кристалла возможен только при наличии теоретических расчетов диэлектрической функции или спектра отражения и экспериментального спектра отражения или диэлектрической функции, рассчитанной на основе спектра отражения по соотношениям Крамерса—Кронига [8]. Теоретические расчеты спектра диэлектрической функции кристаллов типа Bi_2Se_3 крайне затруднены. Поэтому особую ценность могут представить расчеты комплекса оптических функций, основанные на экспериментальных спектрах отражения в широкой области энергии и использовании метода Крамерса—Кронига [8].

При помощи прецизионных спектров отражения кристаллов Bi_2Se_3 при $E \perp c$ в области 1—4.5 эВ при 293 и 80 К [3] и спектров отражения в области 4.5—12 эВ при 293 К [2] по методике [8] нами были рассчитаны в области

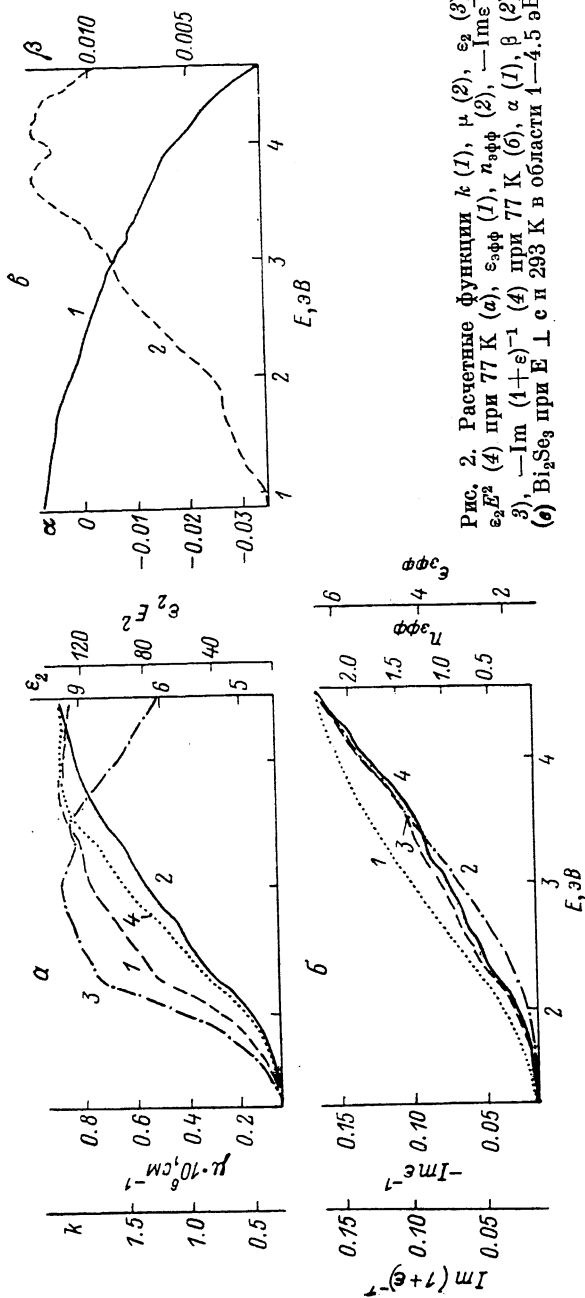


Рис. 2. Расчетные функции k (1), μ (2), ϵ_2 (3), $\epsilon_2 \epsilon^{-1}$ (4) при 77 К (а), $\epsilon_{\text{эфф}}$ (1), $n_{\text{эфф}}$ (2), $-\text{Im} \epsilon^{-1}$ (3), $-\text{Im} (1+\epsilon)^{-1}$ (4) при 77 К (б), α (1), β (2), (3) Bi_2Se_3 при E и n 293 К в области 1—4,5 эВ.

1—12 эВ для 293 К и 1—4.5 эВ при 80 К полные комплексы фундаментальных оптических функций Bi_2Se_3 : показатели поглощения k и преломления n , коэффициент поглощения μ , диэлектрические функции ϵ_2 и ϵ_1 , эффективная функция $\epsilon_{\text{эфф}}$, эффективное число валентных электронов $n_{\text{эфф}}$, участвующих в междузонных переходах до данной энергии E , функции объемных ($-\text{Im}\epsilon^{-1}$) и поверхностных ($-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1}$) плазмонов, дифференциальные функции α и β , функция $\epsilon_2 E^2$ (рис. 1, 2).

Полученные полные комплексы оптических функций содержат наиболее полную информацию об особенностях строения энергетических зон кристалла Bi_2Se_3 в широкой области энергии фундаментального поглощения. Только с их помощью можно наиболее надежно рассчитать зоны Bi_2Se_3 .

Необходимо отметить, что одно электронное приближение может быть не вполне строгим даже для такого узкозонного кристалла, как селенид висмута ($E_g \approx 0.25$ эВ) [1]. К сожалению, теория метастабильных экситонов известна лишь в самом общем виде. Согласно этой теории, большая часть максимумов отражения E_i ($i=1 \div 18$) селенида висмута обусловлена метастабильными экситонами.

Помимо отмеченного значения оптических функций для теории электронной структуры Bi_2Se_3 они могут представлять интерес для практического применения: спектры коэффициента поглощения μ , ϵ_2 , ϵ_1 , n измерить в области $E > E_g$ невозможно из-за непрозрачности кристаллов в области фундаментального поглощения.

Список литературы

- [1] Гольцман Б. М., Кудинов В. А., Смирнов И. А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 . М., 1972. 320 с.
- [2] Sobolev V. V., Shutov S. D., Popov Yu. V., Shestatskii S. N. // Phys. St. Sol. 1968. V. 30. N 1. P. 349—355.
- [3] Соболев В. В., Крамарь В. М., Алексеев В. В. // Матер. для полупроводн. электрон. Кишинев, 1984. С. 98—105.
- [4] Taniguchi K., Moritani A., Hamaguchi C., Nakai J. // Surf. Sci. 1973. V. 37. N 2. P. 562—572.
- [5] Олешко Е. В., Королюшин В. Н. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 10. С. 1839—1841.
- [6] Олешко Е. В., Королюшин В. Н. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 8. С. 1371—1374.
- [7] Greenaway D. L., Harbeke G. // J. Phys. Chem. Sol. 1965. V. 26. N 10. P. 1585—1604.
- [8] Соболев В. В., Алексеева С. А., Донецких В. И. Расчеты оптических функций полупроводников по соотношениям Крамерса—Кронига. Кишинев, 1978. 123 с.

Институт прикладной физики АН МССР
Кишинев

Получена 15.03.1989
Принята к печати 5.04.1989