

# Фундаментальные спектры оптических функций селенида бериллия

© В.Вал. Соболев<sup>¶</sup>, В.В. Соболев

Удмуртский государственный университет,  
426034 Ижевск, Россия

(Получена 23 декабря 2002 г. Принята к печати 27 декабря 2002 г.)

Спектры комплексов оптических фундаментальных функций селенида бериллия получены в области 0–25 эВ. Расчеты выполнены с помощью экспериментального спектра  $\varepsilon_2(E)$  и интегральных соотношений Крамерса–Кронига. На основе метода объединенных диаграмм Арганда спектры диэлектрической проницаемости и характеристических потерь электронов разложены на элементарные поперечные и продольные компоненты. Определены их основные параметры. Полученные данные сопоставлены с теоретическими спектрами оптических функций, рассчитанными методами ОПВ и АПВ, и зонами, полученными в приближении *ab initio* GW.

## 1. Введение

Среди соединений группы  $A^{II}B^{VI}$  халькогениды бериллия выделяются большими значениями энергии запрещенной зоны, высокой стабильностью кубической фазы, прочностью решетки и ковалентным характером межатомных связей [1]. В последние годы все больший интерес проявляется к BeSe благодаря изопериодичности решеток BeSe и GaAs и собственному излучению BeSe в сине-зеленой области спектра [2,3].

Оптические свойства BeSe изучены пока слабо. По спектрам фотолюминесценции сплавов системы BeCdSe [2] и BeZnSe [3] оценены энергии прямых ( $E_{gd}$ ) и непрямых ( $E_{gi}$ ) переходов:  $E_{gd} \approx 5.5$ ,  $E_{gi} \approx 3.7$  эВ. Методом эллипсометрии определены спектры  $\varepsilon_2(E)$  слоя BeSe, выращенного на подложке GaAs, в области 2.5–25 эВ [4,5]. Теоретически рассчитаны зоны [6–8], спектры  $\varepsilon_2$  [6] и  $E^0\varepsilon_2$  [7].

Общепринято, что наиболее полные сведения об электронном строении полупроводника представляют спектры комплекса большого количества оптических фундаментальных функций [9]: мнимой ( $\varepsilon_2$ ) и реальной ( $\varepsilon_1$ ) частей диэлектрической проницаемости; коэффициентов отражения ( $R$ ) и поглощения ( $\mu$ ); показателей преломления ( $n$ ) и поглощения ( $k$ ); реальных ( $\text{Re } \varepsilon^{-1}$ ,  $\text{Re}(1 + \varepsilon)^{-1}$ ) и мнимых ( $-\text{Im } \varepsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1 + \varepsilon)^{-1}$ ) частей объемных и поверхностных характеристических потерь электронов; интегральной функции связанной плотности состояний, которая с точностью до постоянного множителя равна  $E^2\varepsilon_2$  при постоянстве вероятности переходов; эффективного количества валентных электронов  $n_{ef}(E)$ , участвующих в переходах до данной энергии  $E$ , и др. Все эти функции взаимосвязаны, но каждая из них имеет самостоятельное значение. Физический смысл и их взаимосвязь непосредственно вытекают из общих уравнений Максвелла.

Цель настоящего сообщения состоит в получении спектров полного комплекса фундаментальных оптических функций кристалла селенида бериллия, определении полного набора межзонных переходов и их параметров, а также теоретическом анализе полученных данных.

## 2. Методики расчетов

Обычно комплекс оптических функций рассчитывают по специальным программам с помощью интегральных соотношений Крамерса–Кронига и аналитических формул между функциями на основе известного экспериментального спектра  $\varepsilon_2(E)$  или  $R(E)$  в широкой области энергии.

Задача определения параметров тонкой структуры спектров поперечных оптических переходов (энергии  $E_i$  максимума и полуширины  $H_i$ , высоты  $I_i$  и площади  $S_i$  полос, силы осцилляторов  $f_i$ ) обычно решается одним из двух методов: 1) методом воспроизведения интегральной кривой спектра  $\varepsilon_2(E)$  набором лоренцовских осцилляторов с большим количеством подгоночных параметров  $3N$ , достигающим до 30 при  $N = 10$ , 2) методом объединенных диаграмм Арганда также в классической модели лоренцовских осцилляторов, но без подгоночных параметров, благодаря одновременному анализу спектров  $\varepsilon_2(E)$  и  $\varepsilon_1(E)$ . Аналогично рассчитываются параметры продольных компонент переходов по спектрам  $-\text{Im } \varepsilon^{-1}$  и  $\text{Re } \varepsilon^{-1}$ .

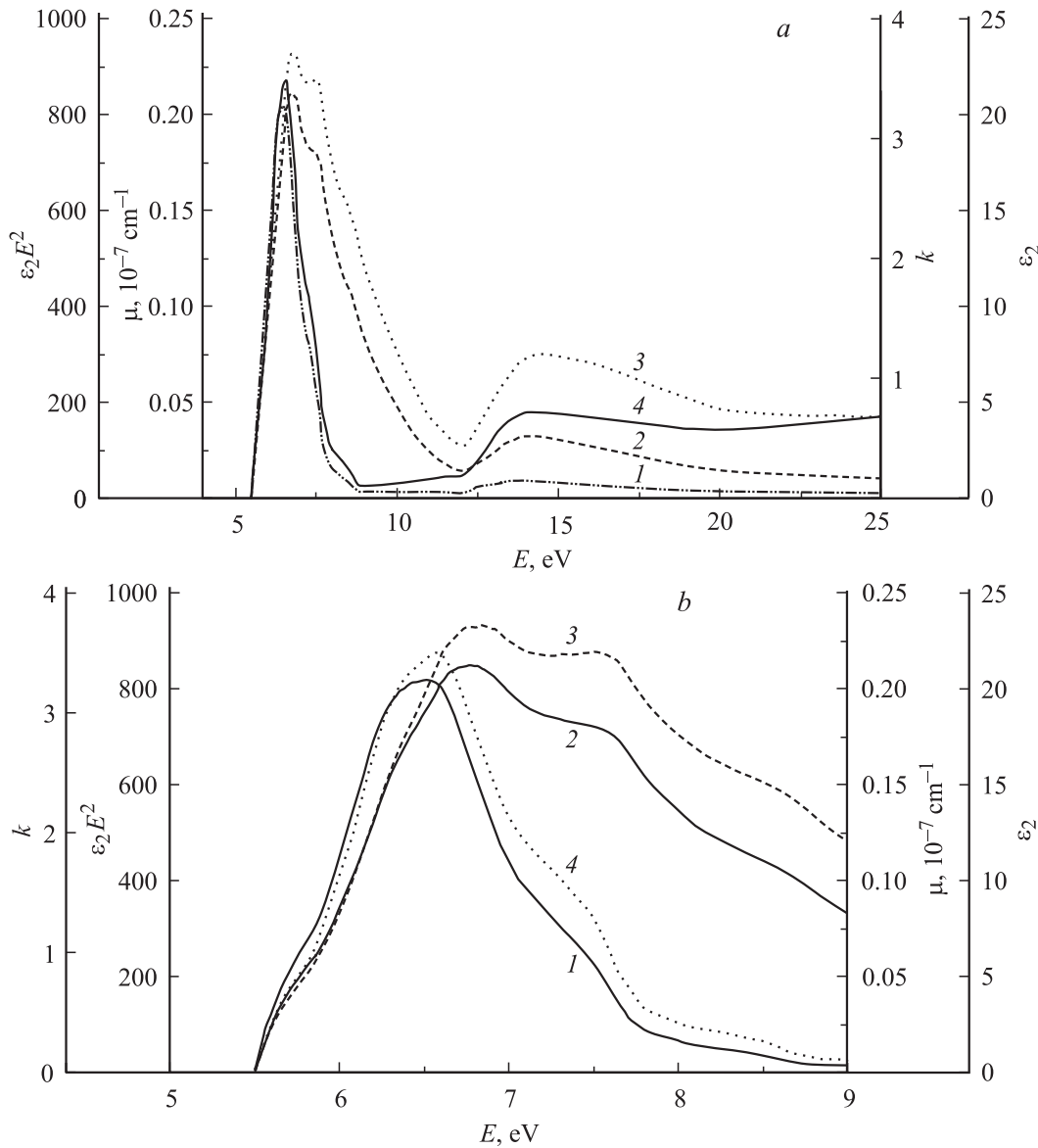
Использованные в работе методы расчетов полного комплекса оптических функций и разложения интегральных спектров  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im } \varepsilon^{-1}$  на элементарные поперечные и продольные компоненты подробно изложены в [9,10] и обсуждены в [11–14].

## 3. Результаты расчетов и их обсуждение

Из всех оптических функций BeSe экспериментально изучен только спектр  $\varepsilon_2(E)$  в области 2.5–25 эВ [4,5]. Измерения выполнены на уникальном специальном эллипсометре с помощью синхротронного излучения. Образцы представляли собой слои BeSe толщиной 0.8 мкм, осажденные на подложке GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МБЕ).

Энергетические зоны BeSe рассчитаны из первых принципов самосогласованным методом ортогонализированных плоских волн в приближении нерелятивистского формализма [6], комбинацией методов присоеди-

<sup>¶</sup> E-mail: sobolev@uni.udm.ru



**Рис. 1.** Экспериментальный спектр  $\varepsilon_2$  (1) и расчетные спектры  $k$  (2),  $\mu$  (3) и  $E^2 \varepsilon_2$  (4) кристалла селенида бериллия в области 5–25 (a) и 5–9 эВ (b).

нения плоских волн и LCAO [7] и в приближении *ab initio* GW [8] для точек направлений  $W$ ,  $L$ ,  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $K$ ,  $G$ . На основе этих зон теоретически были получены спектры  $\varepsilon_2(E)$  в области 5.5–9.0 эВ [6] и  $E^2 \varepsilon_2(E)$  в области 5.5–26 эВ [7].

Нами рассчитаны спектры полных комплексов оптических фундаментальных функций кристалла BeSe в области 0–25 эВ с помощью спектра  $\varepsilon_2(E)$  работ [4,5] (экспериментально-расчетные функции,  $K1$ ) и на основе теоретических данных работ [6,7] (теоретические функции,  $K2$  [6],  $K3$  [7]).

Экспериментальный спектр  $\varepsilon_2(E)$  BeSe содержит интенсивную широкую полосу в области 6–7 эВ со слабо выраженной дублетностью (максимумы при  $\sim 6.3$  и 6.5 эВ), широкий слабый максимум при  $\sim 13.5$  эВ и три ступеньки при  $\sim 5.7$ , 7.3 и 8.15 эВ. В расчетных

спектрах  $k(E)$  и  $\mu(E)$  аналог полосы  $\varepsilon_2$  при  $\sim 6.5$  эВ сместился в область больших энергий на  $\sim 0.3$  эВ, аналог ступеньки  $\varepsilon_2$  при  $\sim 7.3$  эВ стал очень интенсивным максимумом при  $\sim 7.5$  эВ (рис. 1).

Расчетные спектры  $R$ ,  $n$ ,  $\varepsilon_1$  сильно отличаются от спектра  $\varepsilon_2$  (рис. 2, a). В спектре  $R(E)$  наблюдаются самая интенсивная дублетная полоса с максимумами при  $\sim 7.5$  и 8.8 эВ, широкий слабый максимум при  $\sim 14.5$  эВ, слабо выраженный максимум при  $\sim 6.95$  эВ и ступенька при  $\sim 5.6$  эВ. Кривые  $n(E)$  и  $\varepsilon_1(E)$  весьма сходны. Они содержат интенсивную дублетную полосу с максимумами при  $\sim 5.6$  и 6.0 эВ, слабо выраженные максимумы при  $\sim 7.2$  ( $\varepsilon_1$ ) или ступеньку при  $\sim 7.1$  эВ ( $n$ ) и широкий максимум при  $\sim 12.8$  эВ.

В спектрах характеристических потерь электронов имеются традиционно широкие полосы объемных

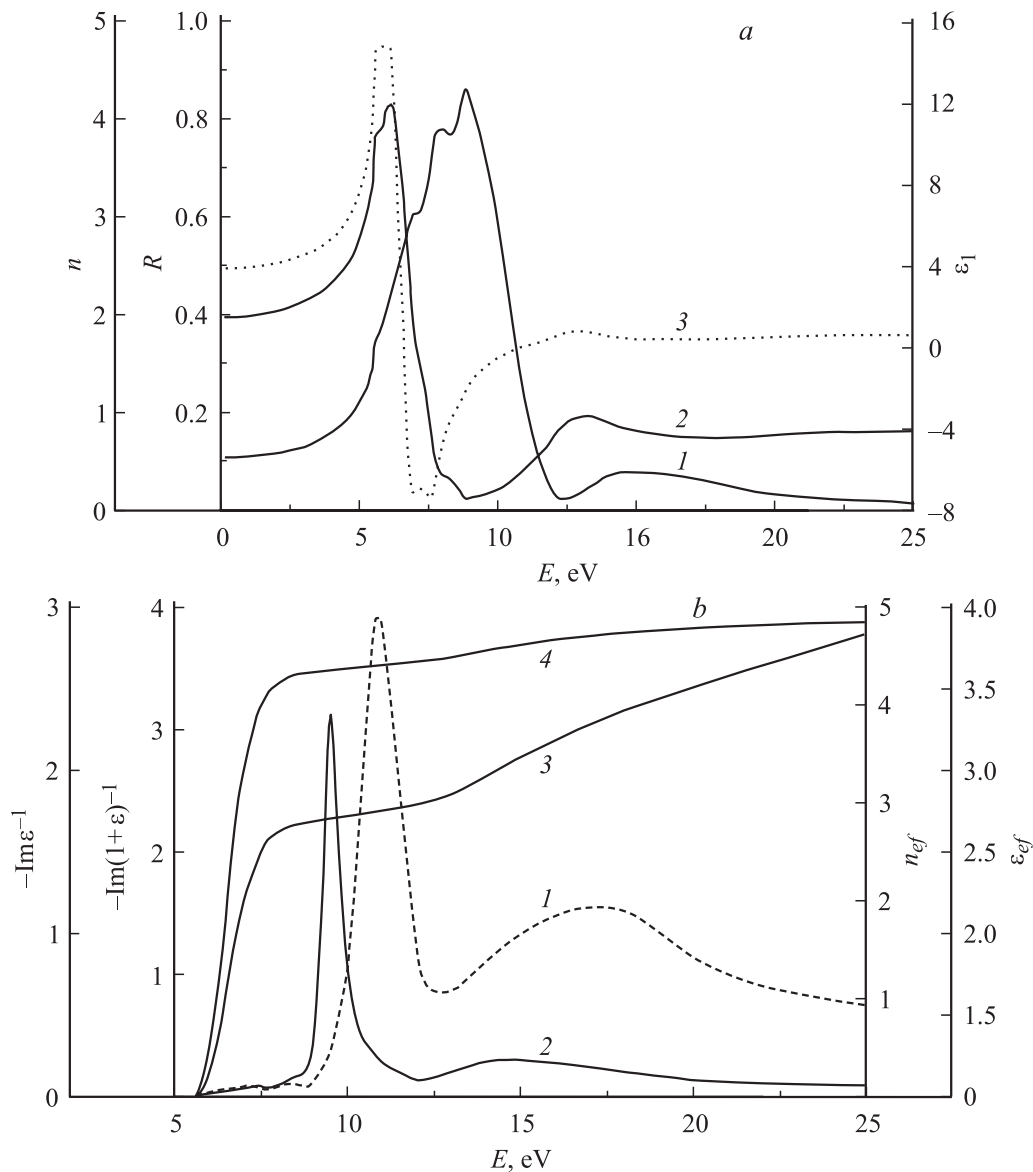


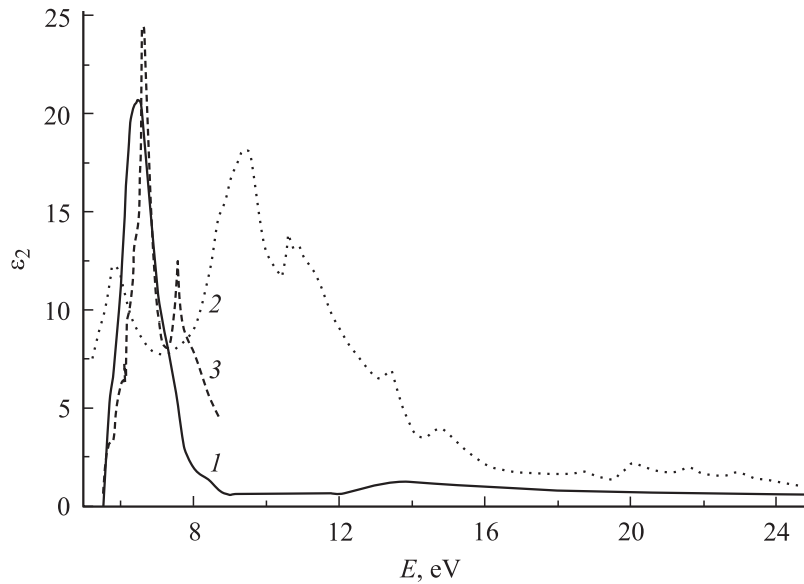
Рис. 2. Спектры  $R$  (1),  $n$  (2),  $\epsilon_1$  (3) (a) и  $-\text{Im} \epsilon^{-1}$  (1),  $-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1}$  (2),  $n_{ef}$  (3) и  $\epsilon_{ef}$  (4) (b) кристалла селенида бериллия.

( $-\text{Im} \epsilon^{-1}$ , 18.55 эВ) и поверхностных ( $-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1}$ , 15.25 эВ) плазмонов (рис. 2, b). Кроме них наблюдаются интенсивные максимумы при  $\sim 10.5$  ( $-\text{Im} \epsilon^{-1}$ ) и 9.25 эВ ( $-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1}$ ), видимо обусловленные возбуждением связанных электронов самых верхних валентных зон. Эти максимумы находятся в области широкого максимума  $\epsilon_2(E)$  9–12 эВ и не могут быть связанными с межзонными переходами.

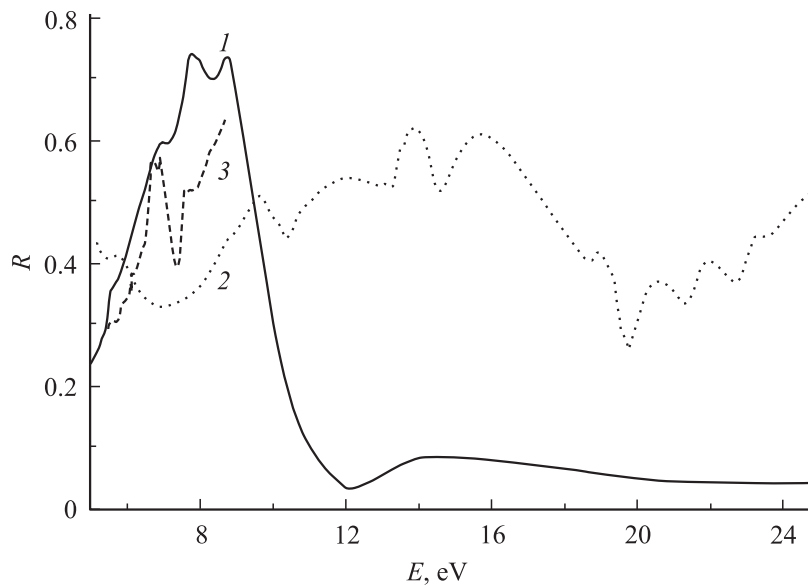
Экспериментальный спектр  $\epsilon_2$  [4,5] и рассчитанные с его помощью спектры остальных оптических фундаментальных функций были сопоставлены нами с теоретическими спектрами  $\epsilon_2$  [6,7] и полученными на их основе другими оптическими функциями. Для краткости на рис. 3, 4 приведены данные для  $\epsilon_2$  и  $R$ . Теоретические данные работы [6] весьма сходны с экспериментальной кривой [4,5] по положению основных максимумов и ступенек. Главное их различие заключается в относитель-

ной интенсивности структур спектров. Это объясняется, видимо, обычными погрешностями теоретических расчетов вероятностей межзонных переходов. Теоретические данные другой работы [7] очень сильно отличаются от экспериментальной кривой  $\epsilon_2$  и расчетной кривой  $R(E)$  как по структуре, так и по распределению интенсивностей между максимумами во всей широкой области энергий 5–25 эВ. Это свидетельствует о больших неточностях расчетов зон работы [7].

С помощью спектров двух пар функций  $\epsilon_2$  и  $\epsilon_1$ ,  $-\text{Im} \epsilon^{-1}$  и  $\text{Re} \epsilon^{-1}$  методом объединенных диаграмм Арганда спектры  $\epsilon_2$  и  $-\text{Im} \epsilon^{-1}$  были разложены на 6 поперечных и 16 продольных компонент (см. таблицу). После максимума при  $\sim 13.5$  эВ значения  $\epsilon_2(E)$  сильно уменьшаются, что существенно затрудняет установление поперечных компонент № 10–16. Наоборот, значения  $-\text{Im} \epsilon^{-1}$  в этой области энергии самые большие, что



**Рис. 3.** Экспериментальный [4,5] (1) и теоретические [7] (2), [6] (3) спектры  $\varepsilon_2(E)$  кристалла селенида бериллия.



**Рис. 4.** Спектры  $R(E)$  кристалла селенида бериллия, рассчитанные с помощью экспериментального [4,5] (1) и теоретических спектров  $\varepsilon_2(E)$  [7] (2), [6] (3).

позволяет весьма уверенно выделять продольные составляющие полос переходов.

Площади поперечных компонент превосходят значения  $S_i$  их продольных аналогов в сотни раз в области энергии  $E < 8$  эВ. Это свидетельствует о том, что вероятности возбуждения продольных составляющих полос переходов BeSe в области  $E < 8$  эВ ничтожно малы по сравнению с вероятностями переходов их поперечных аналогов.

В модели зон все максимумы и ступеньки спектров оптических функций и компоненты разложения  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$  кристалла BeSe обусловлены прямыми межзонными переходами. На основе анализа теоретических

зон работ [6,8] нами были оценены энергии возможных наиболее интенсивных прямых межзонных переходов в точках  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $L$ ,  $W$  и направлениях  $\Gamma X$ ,  $\Gamma L$ ,  $XW$  (последние два столбца таблицы).

Согласно общей теории оптических свойств полупроводников [9], некоторые компоненты спектров  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$  кристалла BeSe могут быть связанными с метастабильными экситонами.

В настоящем сообщении впервые получены спектры полного комплекса оптических фундаментальных функций кристалла BeSe в области 0–25 эВ; спектры диэлектрической проницаемости и характеристических потерь электронов разложены на поперечные и продоль-

Энергии максимумов полос  $E_i$  и полуширины  $H_i$  (эВ), высоты  $I_i$  и площади полос  $S_i$  поперечных ( $\epsilon_2$ ) и продольных ( $\epsilon^{-1}$ ) компонент, а также локализация в точках зоны Бриллюэна ( $\Gamma, L, X, W$ ) и энергия (эВ) полос по теории [6,8] для кристалла BeSe

№	$E_i$		$H_i$		$I_i$		$S_i$		[8]	[6]
	$\epsilon_2$	$\epsilon^{-1}$	$\epsilon_2$	$\epsilon^{-1}$	$\epsilon_2$	$\epsilon^{-1}$	$\epsilon_2$	$\epsilon^{-1}$		
1	5.71	5.70	0.21	0.20	2.80	0.03	0.92	0.01	$\Gamma$ , 5.6	$\Gamma L$ , 5.7
2	6.30	6.33	0.52	0.30	16.48	0.05	13.15	0.02	$\Gamma X$ , 6.5	$\Gamma X$ , 6.0, $\Gamma L$ , 5.8
3	6.72	6.79	0.55	0.35	13.50	0.06	11.46	0.03	$\Gamma L$ , 6.6	$\Gamma X$ , 7.2
4	7.27	7.30	0.30	0.40	5.50	0.09	2.56	0.05	$L$ , 7.1	$\Gamma X$ , 7.2
5	—	7.85	—	0.35	—	0.07	—	0.04	$\Gamma X$ , 8.1	$\Gamma L$ , 7.6
6	8.15	8.35	0.40	0.45	1.10	0.13	0.68	0.09	$\Gamma L$ , 8.3	$\Gamma X$ , 8.3
7	—	10.45	—	1.35	—	1.50	—	3.06	$X$ , 9.0	$\Gamma L$ , 10.1
8	—	11.70	—	1.90	—	0.56	—	1.59	$\Gamma L$ , 12.0	$W$ , 10.9
9	13.50	13.90	1.00	2.20	1.35	0.39	2.61	1.28	$\Gamma L$ , 14.0	$\Gamma L$ , 15.1
10	—	15.90	—	2.50	—	0.67	—	2.51	$XW$ , 16.0	$\Gamma X$ , 16.5
11	—	18.00	—	2.20	—	0.67	—	2.23	$X$ , 18.0	$\Gamma L$ , 17.0
12	—	20.00	—	2.20	—	0.67	—	2.24	$\Gamma$ , 20.2	$\Gamma L$ , 19.0
13	—	22.00	—	2.20	—	0.63	—	2.11	$\Gamma$ , 23.0	—
14	—	24.00	—	2.20	—	0.65	—	2.18	$\Gamma$ , 23.0	—
15	—	26.00	—	2.20	—	0.65	—	2.19	$\Gamma$ , 26.0	—
16	—	28.30	—	2.30	—	1.09	—	3.84	—	—

ные компоненты, определены их параметры и предложена схема их конкретной природы в модели прямых межзонных переходов. Установлено хорошее согласие экспериментального [4,5] и теоретического [6] спектров  $\epsilon_2(E)$ , а также спектров других оптических функций, рассчитанных на их основе. Это свидетельствует о правильности расчетов зон BeSe работы [6] в области межзонных переходов  $E < 8$  эВ. Полученные результаты позволяют существенно глубже и детальнее анализировать оптические свойства и электронную структуру кристалла BeSe в широкой области энергии, создают принципиально новую основу для дальнейших более точных теоретических расчетов зон и спектра  $\epsilon_2(E)$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Конкурсного центра фундаментального естествознания (Санкт-Петербургский государственный университет).

### Список литературы

[1] W.M. Yim, J.P. Dismukes, E.J. Stofka, R.A. Paff. *J. Phys. Chem. Sol.* **33**, 501 (1972).  
 [2] О.В. Некруткина, С.В. Сорокин, В.А. Кайгородов, А.А. Ситникова, Т.В. Шубина, А.А. Торопов, С.В. Иванов, П.С. Копьев, Г. Решер, В. Вагнер, Дж. Гоерц, А. Ваар, Г. Ландвер. *ФТП*, **35**, 541 (2001).  
 [3] C. Chauvet, E. Tournie, J.-P. Faurie. *Phys. Rev. B*, **61**, 5332 (2000).  
 [4] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet. *Phys. Rev. B*, **59**, 10071 (1999).  
 [5] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet. *Phys. St. Sol. (b)*, **215**, 15 (1999).  
 [6] D.J. Stukel. *Phys. Rev. B*, **2**, 1852 (1970).  
 [7] R.L. Sarkar, S. Chatterjee. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **10**, 57 (1977).

[8] A. Fleszar, W. Hanke. *Phys. Rev. B*, **62**, 2466 (2000).  
 [9] В.В. Соболев, В.В. Немошкленко. *Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников* (Киев, Наук. думка, 1988).  
 [10] В.В. Соболев. *Журн. прикл. спектроскопии*, **63**, 143 (1996).  
 [11] В.В. Соболев, А.П. Тимонов, В.Вал. Соболев. *ФТП* **34**, 940 (2000).  
 [12] В.В. Соболев, А.И. Калугин. *ФТП*, **36**, 155 (2002).  
 [13] В.Вал. Соболев, О.Р. Желтышева, В.В. Соболев. *Тр. III Межд. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники“* (СПб., Изд-во СПбГПУ, 2002) с. 92.  
 [14] В.Вал. Соболев, О.Р. Желтышева, В.В. Соболев. *Тр. Межд. конф. „Оптика, оптоэлектроника и технология“* (Ульяновск, Изд-во УлГУ, 2002) с. 113.

Редактор Л.В. Беляков

### Fundamental spectra of the optical functions of BeSe

V.Val. Sobolev, V.V. Sobolev

Udmurt State University,  
426034 Izhevsk, Russia

**Abstract** Spectra of the sets of optical fundamental functions of beryllium selenide were obtained in the range 0–25 eV. The calculations were performed with the aid of an experimental  $\epsilon_2(E)$  spectrum using the integral Kramers–Kronig relations. Based on the method of unified Argand diagrams, the spectra of dielectric function and characteristic electron loss were decomposed into the elementary transverse and longitudinal components. Their main parameters were determined. The data obtained were compared to theoretical spectra of optical functions, calculated by the OPW and APW methods, and to the bands, obtained in the *ab initio* GW approximation.