ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 3, № 2 (2002) С. 335-337

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V.3, №2 (2002) P. 335-337

УДК 539.184

Н.К. Крамар, В.М. Крамар, Б.М. Ніцович

Розрахунок оптичних параметрів шаруватого напівпровідникового кристала PbI_2

Чернівецький Національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, м. Чернівці, 58012, Україна

На основі розрахованого з перших принципів методом псевдопотенціалу зонного спектра визначено оптичні параметри кристалу, зокрема спектри поглинання і відбивання шаруватого напівпровідникового кристалу PbI2.

Ключові слова: шаруватий кристал, дийодид свинцю, оптичні параметри, спектри поглинання і відбивання.

Стаття поступила до редакції 17.11.2001; прийнята до друку 3.06.2002

Для більшості шаруватих кристалів характерна анізотропія фізичних параметрів, наприклад ефективних мас носіїв заряду [1], спектрів поглинання і відбивання [2], що пояснюється специфічною будовою їх електронного і коливного спектрів, обумовленою особливостями кристалічної структури.

В даній роботі приводяться результати обчислень ряду оптичних параметрів шаруватого напівпровідника PbI2, виконаних на основі розрахованого в [3] енергетичного спектру його електронної системи методом псевдопотенціалів з використанням нелокального "з перших принципів" псевдопотенціалу [4], що зберігає норму псевдохвильових функцій. У першому порядку теорії збурень їх можна шукати у вигляді розвинення у базисі плоских хвиль:

$$|\varphi_{n\vec{k}}> = a_{n\vec{k}}(0)\,|\vec{k}> + \sum_{\vec{g}\neq 0} a_{n\vec{k}}(\vec{g})\,|\vec{k}-\vec{g}>,$$

де $a_{n\vec{k}}(0)$ та

$$a_{n\vec{k}}(\vec{g}) = \frac{\left\langle \vec{k}-\vec{g}\,\middle|\,V_{ps}\,\middle|\,\vec{k}\right\rangle}{T_{\vec{k}} - T_{\vec{k}-\vec{g}}}\, a_{n\vec{k}}(0),\ (\vec{g}\neq 0)$$

– члени, відповідно, нульового та першого порядків по псевдопотенціалу V_{ps} ($T_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2/2m$ – енергія вільного електрона і $T_{\vec{k}} \neq T_{\vec{k}-\vec{g}}$), які можна знайти розв'язуючи секулярне рівняння. У [3] знайдено явний вигляд форм-факторів нелокального псевдопотенціалу для атомів свинцю і йоду і проведено процедуру самоузгодженого розрахунку елементів матриці секулярної задачі з урахуванням ефектів екранування атомних потенціалів і обмінно-кореляційної взаємодії. У першому порядку теорії збурень вони визначаються як самоузгоджені по величині $\sum_{n,\vec{k}} \left|a_{n\vec{k}}(0)\right|^2$ розв'язки рівняння

$$\left\langle \vec{K}'\right|\ V_{ps}\ \left|\vec{K}\right\rangle = \left\langle \vec{K}'\right|\ V_{ps}^{b}\left|\vec{K}\right\rangle + \left(\frac{16\pi}{g^2\Omega} - \frac{\sqrt[3]{6}}{\sqrt[3]{\pi\Omega}\,[\sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2]^{2/3}}\right) \times \sum_{n,\vec{k}} \left|a_{n\vec{k}}(0)\right|^2 \frac{\left\langle \vec{K}'\right|\ V_{ps}\left|\vec{K}\right\rangle}{T_{\vec{K}} - T_{\vec{K}'}}$$

з нульовим наближенням $\left\langle \vec{K}'\right|\ V_{ps}\ \left|\vec{K}\right\rangle^{(0)} = \left\langle \vec{K}'\right|\ V_{ps}^{b}\left|\vec{K}\right\rangle$ (тут $\vec{K} = \vec{k} - \vec{g}$). Величини коефіцієнтів $a_{n\vec{k}}(0)$ знаходяться у кожній точці $\vec{k}$ на кожному етапі ітераційної процедури пошуку розв'язків секулярного рівняння, що містить їх у якості параметрів самоузгодження, як компоненти відповідних власних векторів одноелектронного псевдогамільтоніану у базисі плоских хвиль і дозволяють розрахувати уявну частину діелектричної функції [5]

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2\hbar^2}{3\pi\ \ m^2\omega^2} \sum_{c,v} \int d^3k\,\delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \times |<\varphi_{v\vec{k}}\,|\,\vec{\nabla}\cdot\vec{e}\,|\,\varphi_{c\vec{k}}>|^2 \qquad (1)$$

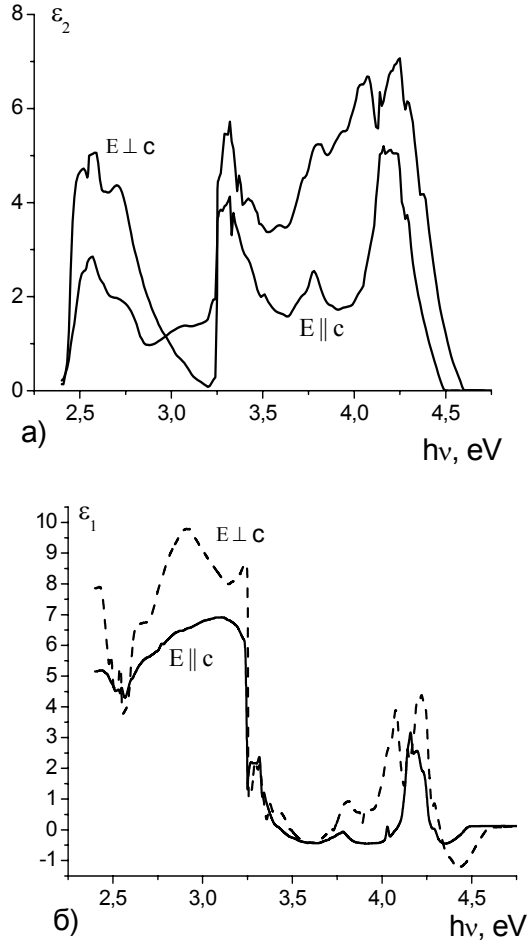

Рис. 1. Спектральні залежності уявної а) та дійсної б) частин діелектричної функції PbI_2.

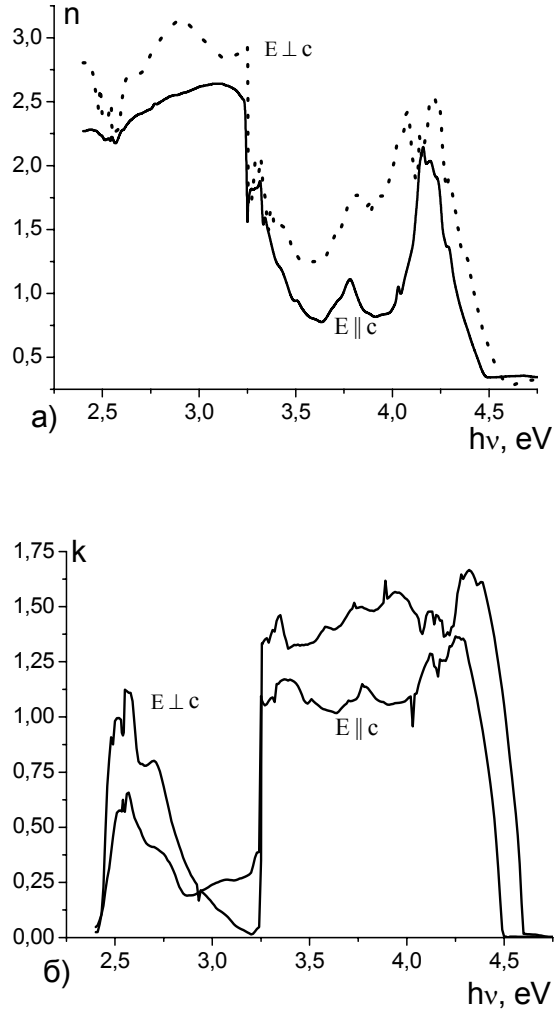

Рис. 2. Спектральні залежності показників заломлення а) і поглинання б) кристалу PbI_2.

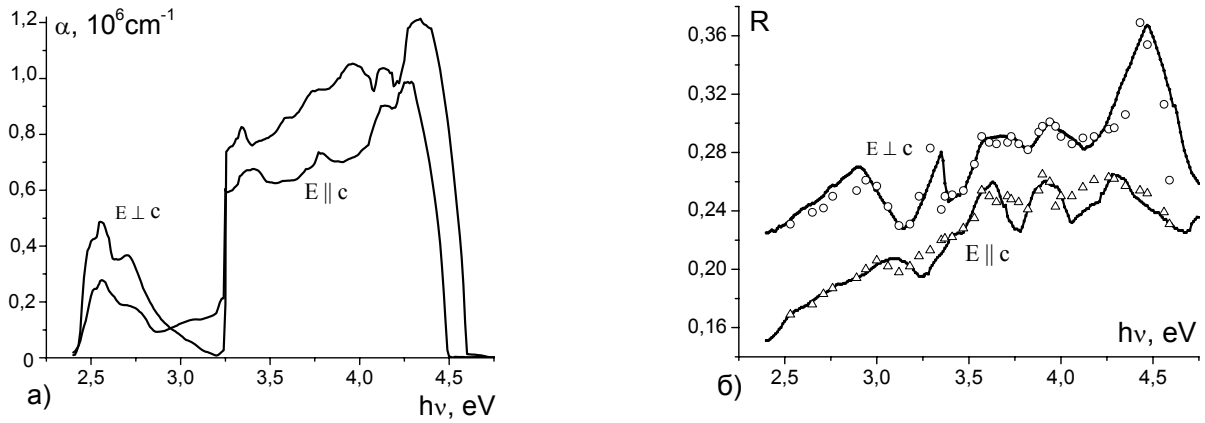

Рис. 3. Спектри поглинання а) та відбивання; б) PbI_2 (○ та Δ – результати вимірювань [5]).

де через $E_v(\vec{k})$ і $E_c(\vec{k})$ позначено енергії валентної зони і зони провідності, а $\vec{e}$ – вектор поляризації падаючого світла. Інтеграл у (1) може бути записаний у вигляді [6]

$$\int \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\vec{k})|} |<\varphi_{v\vec{k}}|\vec{\nabla}\cdot\vec{e}|\varphi_{c\vec{k}}>|^2 , \qquad (2)$$

де інтегрування здійснюється вздовж поверхні постійної енергії $E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = \hbar\omega$. Процедура інтегрування реалізована методом тетраедрів [6] з використанням набору точок незвідної частини зони Бріллюена. Реальна частина діелектричної функції знаходилась за співвідношенням Крамерса-Кроніга:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \, d\omega' \qquad (3)$$

з використанням розрахованої залежності $\varepsilon_2(\omega)$ в межах інтервалу енергій 2,4...8,5 еВ та її аналітичного продовження у вигляді запропонованої в [5] функції $\beta\omega/(\omega^2+\gamma^2)$, де β і γ підібрані відповідно параметри.

Результати розрахунків для двох поляризацій: у площини шарового пакету ($\vec{E} \perp c$) та перпендикулярно до неї ($\vec{E} \parallel c$), подані на рис. 1.

Знайдені залежності $\varepsilon_1(\omega)$ і $\varepsilon_2(\omega)$ дозволяють встановити оптичні параметри кристала (рис. 2), спектри поглинання в області міжзонних переходів, а також спектри відбивання (рис. 3), які узгоджуються з результатами експериментальних вимірювань при 4,2 К, наведеними в [5].

Н.К. Крамар *– молодший науковий співробітник кафедри оптики і спектроскопії;*
В.М. Крамар *– кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри оптики і спектроскопії;*
Б.М. Ніцович *– доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри оптики і спектроскопії.*

[1] М.С. Бродин, И.В. Блонский. *Экситонные процессы в слоистых кристаллах*. Наукова думка, К. (1986).
[2] Широкозонные слоистые кристаллы и их физические свойства / Под ред. А.Б. Лысковича. Вища школа, Львов, (1982).
[3] Н.К. Крамар, В.М. Крамар, Б.М. Ніцович. Розрахунок ефективних мас електронів і дірок у шаруватому напівпровідниковому кристалі PbI_2 // *Фізика і хімія твердого тіла* **2**(3), сс. 423-431 (2001).
[4] G.B. Bachelet, D.R. Hamann, M. Schlüter. Pseudopotentials that work: From H to Pu // *Phys. Rev. B.,* **26**(8) pp. 4199- 4228 (1982).
[5] M. Schlüter, I.Ch. Schlüter. Electronic structure and optical properties of PbI_2 // *Phys. stat. sol. (b)*., **57**(4) pp. 1652-1663 (1973).
[6] Достижения электронной теории металлов / Под ред. П. Цише, Г. Лиманна. Мир, М., (1984).

N.K. Kramar, V.M. Kramar, B.M. Nitsovych

Calculations of the Optical Constants of the Layer Semiconductor Crystal PbI_2

Chernivtsi National University,
2 Kotsyubinskyy Str., 58012, Chernivtsi, Ukraine

On the base of ‘ab initio’ pseudopotential method the energy spectra calculations there were obtained the real and imaginary parts of dielectric function of the layer semiconductor PbI_2. This allows to calculate optical constants of the crystal, in particular, here absorption and reflectivity.