

УДК 538.958

DOI: 10.17223/00213411/62/5/69

В.Вал. СОБОЛЕВ¹, В.В. СОБОЛЕВ²

ПАРАМЕТРЫ СЛОЖНОЙ СТРУКТУРЫ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ СТАННИДА ДИМАГНИЯ

Спектры шестнадцати оптических функций кристалла Mg_2Sn определены в области 1–11 эВ при 77 К. Расчеты выполнены с помощью известных экспериментальных спектров отражения $R(E)$, пакетов компьютерных программ, созданных на основе соотношений Крамерса – Кронига и аналитических формул связи между оптическими функциями. Установлены их основные особенности и общие закономерности. Интегральные спектры мнимой части диэлектрической проницаемости $\epsilon_2(E)$ разложены на элементарные компоненты в области 2–5.5 эВ с использованием усовершенствованного беспараметрического метода объединенных диаграмм Арганда с учетом эффективного количества валентных электронов, участвующих в формировании отдельных полос. Были определены энергии максимумов и силы осцилляторов элементарных компонент полос переходов, предложена их предполагаемая природа и локализация на основании данных известных теоретических расчетов.

Ключевые слова: станнид димагния, оптическая функция, максимум, ступенька, междузонный переход, экситон, сила осциллятора, диэлектрическая проницаемость, объемные и поверхностные потери энергии, диаграмма Арганда, усовершенствованный метод.

Введение

Станнид димагния относится к группе соединений Mg_2X ($\text{X} - \text{Si, Ge, Sn}$), которые весьма перспективны для современной твердотельной электроники. Эти соединения обладают высокой термостабильностью, стойкостью к окислительным и агрессивным средам. Mg_2Sn и его твердые растворы $\text{Mg}_2\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ ($0.250 \leq x \leq 0.875$) являются одними из наиболее эффективных термоэлектрических материалов для высокотемпературных термогенераторов [1].

Полупроводниковое соединение Mg_2Sn кристаллизуется в структуре антифлюорита – кубической гранецентрированной решетке с пространственной группой симметрии $Fm\bar{3}m$ (O_h^5) и постоянной решетки $a = 6.659 \text{ \AA}$ [2]. Зоны Бриллюэна (ЗБ) кристаллов групп Mg_2X ($\text{X} - \text{Si, Ge, Sn}$) и A^4 аналогичны, но у соединений Mg_2X в элементарной ячейке (ЭЯ) – три атома [3]. У станнида димагния непрямая запрещенная зона с $E_{gi} \approx 0.3 \text{ эВ}$ [4]. Согласно анализу спектров колебательных частот, решетки Mg_2Sn – это частично ионное соединение [5]. По оценкам работы [6] величина спин-орбитального расщепления в точке L валентной зоны примерно 0.16 эВ. По спектрам преломления работы [5], определенным методом призмы, были получены оценочные значения коэффициента отражения ($R \approx 0.37$) станнида димагния в области прозрачности.

Для исследования структуры зон Mg_2Sn в широкой области энергии [4, 6, 7] использовался метод спектров отражения. В работе [6] были получены спектры отражения полированных поликристаллов Mg_2Sn в области 1–6 эВ при $T = 293 \text{ К}$, затем в работе [7] – свежих зеркальных сколов монокристаллов в области 1.5–12.5 эВ при $T = 293 \text{ К}$ и 1.5–5 эВ при $T = 77 \text{ К}$. В [4] были получены спектры отражения монокристалла станнида димагния при $T = 77 \text{ К}$ в области 1–11 эВ. В работе [6] было обнаружено шесть пиков спектра отражения: в окрестности 400 нм – самый интенсивный дублетный пик, в окрестности 300 нм – два гораздо менее интенсивных пика, а также два дополнительных широких слабозапрещенных пика около 660 и 800 нм. В [7] при помощи метода прецизионной регистрации была выявлена сложная структура спектра отражения в виде четырех полос. На сколах кристалла Mg_2Sn при 77 К был получен наиболее корректный спектр $R(E)$ в области 1–11 эВ [4]. Результаты, полученные в [4, 6, 7], в основном согласуются по положению и количеству обнаруженных структур в спектрах отражения.

Природа максимумов спектров отражения сколов монокристалла станнида димагния в области 1–10 эВ, установленных в [6, 7], была обсуждена в [8] на основе известных теоретических расчетов зон и спектров $\epsilon_2(E)$.

Электронная структура станнида димагния и его твердых растворов $\text{Mg}_2\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ была рассчитана многими теоретическими методами [2, 3, 9–13]. Результаты расчетов энергетических зон несколько различаются по расположению минимума нижней зоны проводимости (НЗП) и величине

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>