Письма в ЖЭТФ, том 27, вып. 2, стр. 84 – 87 *20 января 1978 г.*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЩЕЛЕЙ В МЕТАЛЛАХ ОПТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

И.Д.Маш, Г.П.Мотулевич, А.А.Шубин

В работе предложен метод разделения перекрывающихся полос межзонной проводимости, основанный на использовании аналитических свойств комплексной диэлектрической проницаемости, связанной с межзонными переходами. Метод позволяет определить число полос межзонной проводимости, найти положения максимумов отдельных полос, и, таким образом, определить энергетические щели в металлах. Метод применен к анализу экспериментальных результатов для ванадия.

1. Измерение оптических постоянных металлов позволяет получить много ценной информации об их электронной структуре [1]. В частности, изучая межзонные переходы, можно определить энергетические щели в металлах, связанные с периодическим статическим потенциалом решетки. Структура межзонных переходов состоит из ряда полос с максимумами для $\epsilon_2(\omega)$ и областями аномальной дисперсии для $\epsilon_1(\omega)$, где $\epsilon_1 = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ – комплексная диэлектрическая проницаемость. Как правило полосы имеют большую ширину и перекрываются между собой. Положения максимумов ω_{max} полос определяют энергетические щели, имеющиеся в металле для электронных состояний в области брегговских плоскостей. Поэтому важно уметь разделять отдельные полосы и находить ω_{max}. Настоящая работа посвящена этой задаче.

2. Основная структура полос межзонной проводимости связана с брегговскими плоскостями. Изоэнергетические поверхности вблизи указанных плоскостей идут параллельно, что приводит к максимумам комбинированной межзонной плотности состояний и к соответствующим максимумам функции $\epsilon_2(\omega)$ [2, 3]. Форма полос межзонной проводимости рассчитана в работах [3]. Обозначим ϵ_g вклад в суммарную диэлектрическую проницаемость ϵ переходов, связанных с физически эквивалентными брегговскими плоскостями, которые мы будем обозначать индексом g.

$$\epsilon_g = \epsilon_{1g} + i\epsilon_{2g} = C_g \int_0^{\infty} \frac{dx}{(1 + x^2)^{3/2}} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + x^2} - \omega'_g - i\nu'_g} + \frac{1}{\sqrt{1 + x^2} + \omega'_g + i\nu'_g} \right], \quad (1)$$

$$\omega'_g = \omega/\omega_g; \quad \nu'_g = \nu_g/\omega_g; \quad \omega_g = 2|V_g|/\hbar, \quad (2)$$

где C_g – константа, ν_g – эффективная частота соударений, V_g – фурье компонента псевдопотенциала. В работе [3] приводятся результаты численного вычисления интеграла для разных ω'_g и ν'_g. Ниже индекс g мы будем опускать.

Для интеграла может быть получено аналитическое выражение, использование которого дает следующие формулы[1]:

$$\epsilon_1(\omega', \nu') + i\epsilon_2(\omega', \nu') = C\pi \frac{(1-\omega'^2+\nu'^2+A) + i\nu'\omega'(2+1/A)}{(1-\omega'^2+\nu'^2+A)^2 + (\nu'\omega')^2(2+1/A)^2}, \tag{3}$$

$$A = \left[\frac{1}{2}\left(1-\omega'^2+\nu'^2+\sqrt{(1-\omega'^2+\nu'^2)^2+4\omega'^2\nu'^2}\right)\right]^{1/2}. \tag{4}$$

3. Независимо от формы полос межзонного поглощения для нашей цели мы воспользуемся только тем обстоятельством, что $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ является аналитической комплексной функцией комплексного аргумента $z = \omega' + i\nu'$. Можно перейти от функции ϵ к функции $\epsilon^* = \epsilon - i\gamma d\epsilon/dz$. Преобразование связано с изменением линейного члена разложения ϵ по z в точке (ω', ν'). При $\gamma \leq \nu'$ линейный член уменьшается, при $\gamma > \nu'$ он меняет знак. Уменьшение линейного члена или изменение его знака приводит к сужению полос, что позволяет легко разделить перекрывающиеся полосы. Разделив действительную и мнимую части и перейдя от $d\epsilon/dz$ к $d\epsilon/d\omega$, получим

$$\epsilon_1^* = \epsilon_1 + \gamma d\epsilon_2/d\omega; \qquad \epsilon_2^* = \epsilon_2 - \gamma d\epsilon_1/d\omega. \tag{5}$$

Проиллюстрируем метод на межзонных переходах, описываемых уравнением (3). На рис. 1,*а* и 1,*б* приведены функции $\epsilon_1^*(\omega')$ и $\epsilon_2^*(\omega')$ при $\nu' = 0{,}4$ и разных γ. Из рисунков видно насколько существенно улучшается разрешение отдельных полос.

4. При использовании предложенного метода для обработки экспериментальных результатов нужно иметь в виду, что метод предполагает наличие достаточно подробных и точных измерений и обязательно требует предварительного сглаживания экспериментальных функций $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$. Чем больше коэффициент γ, тем больше влияние члена с про-

---

[1] Эквивалентные выражения были получены в работе [4]. Однако в статье допущена опечатка для действительной части интеграла. Правильные формулы имеют вид

$$\epsilon_2 = \frac{2\pi C\omega'/\nu'}{(\omega'^2+\nu'^2)^2}\left[\frac{\omega'^2-\nu'^2-1/2}{b(a^2+b^2)} - \frac{1}{2b} + 1\right];$$

$$\epsilon_1 = \frac{\pi C}{2(a^2+b^2)b} - \frac{\omega'^2-\nu'^2}{2\omega'/\nu'}\epsilon_2; \qquad a^2+b^2 = [(1-\omega'^2+\nu'^2)^2+4\omega'^2\nu'^2]^{1/2};$$

$$b^2 = \frac{1-\omega'^2+\nu'^2}{2} + \frac{1}{2}[(1-\omega'^2+\nu'^2)^2+4\omega'^2\nu'^2]^{1/2}.$$

изводной и тем более жесткие требования к шагу измерений и к степени сглаживания. Для каждой области спектра должно быть подобрано оптимальное значение γ.

Далее, величины энергетических щелей можно определить, используя соотношение $\Delta \approx \hbar\omega_{max}$, где Δ — соответствующая энергетическая щель, ω_{max} — положение максимума функции $\epsilon_2(\omega)$. Если требуется большая точность для Δ, то следует учесть небольшую разность между этими величинами, связанную с величиной ν'. Этот вопрос обсуждается в работах [3].

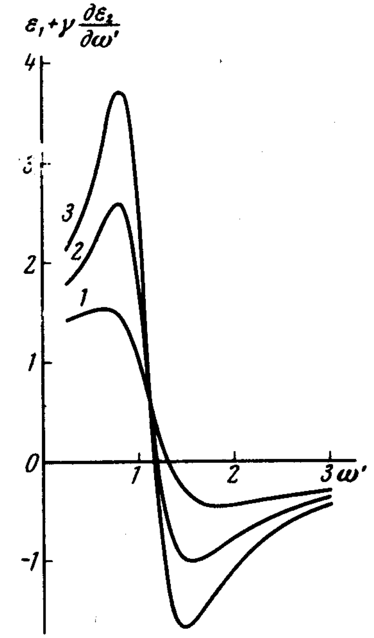

Рис. 1, *а*. Зависимость функции $\epsilon_1(\omega') + \gamma\, d\epsilon_2(\omega)/d\omega'$ от ω' при $\nu' = 0{,}4$: *1* — $\gamma = 0$; *2* — $\gamma = 0{,}4$; *3* — $\gamma = 0{,}8$

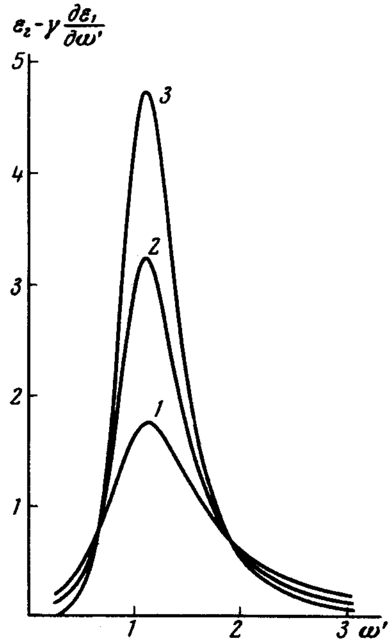

Рис. 1, *б*. Зависимость функции $\epsilon_2(\omega') - \gamma d\epsilon_1(\omega')/d\omega'$ от ω' при $\nu' = 0{,}4$: *1* — $\gamma = 0$; *2* — $\gamma = 0{,}4$; *3* — $\gamma = 0{,}8$

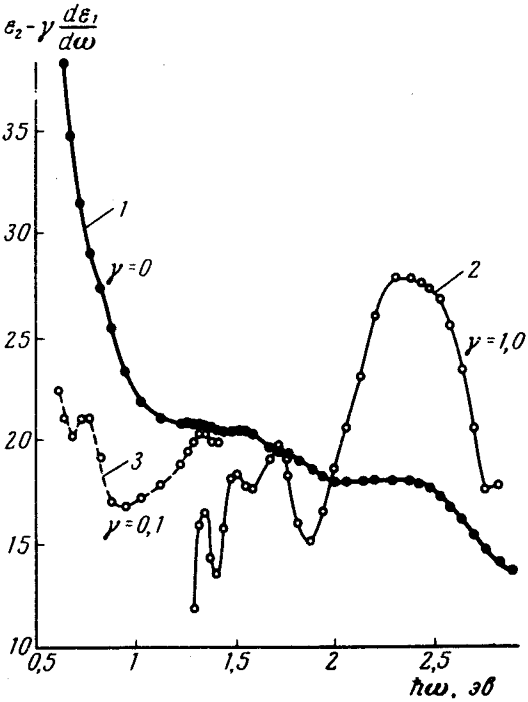

Рис. 2. Разделение полос межзонной проводимости ванадия. По оси ординат – экспериментальные значения функции $\epsilon_2(\omega) - \gamma d\epsilon_1(\omega)/d\omega$; 1 – $\gamma = 0$; 2 – $\gamma = 1,0$ эв; 3 – $\gamma = 0,1$ эв

5. Предложенный метод применен к анализу оптических постоянных ванадия [5]. От безразмерных ω' и γ мы перешли к ω и γ в единицах эв. Экспериментальные функции $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$ предварительно сглаживались по алгоритму, использующему многочлены третьей степени [6]. На рис. 2 приводятся функция $\epsilon_2(\omega)$ (кривая 1) и функции $\epsilon_2(\omega) - \gamma d\epsilon_1(\omega)/d\omega$. В видимой области $\gamma = 1,0$ эв (кривая 2), в инфракрасной $\gamma = 0,1$ (кривая 3). Из рисунка ясно видно, как существенно улучшилось разрешение полос межзонной проводимости. В спектральной области $0,5 \div 2,8$ эв у ванадия наблюдается пять полос с максимумами при 0,75; 1,35; 1,51; 1,72 и 2,30 эв. Таким образом, у ванадия в указанной области имеется пять энергетических щелей, значения которых близки к приведенным значениям ω_{max}. Дальнейшее уточнение значений Δ требует знания ν'. Отождествление полос требует дополнительных исследований.

Физический институт им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
16 ноября 1977 г.

Литература

[1] Г.П.Мотулевич. УФН, 97, 211, 1969; Труды ФИАН, 55, 3, 1971.

[2] W.A.Harrison. Phys. Rev., 147, 467, 1966.

[3] А.И.Головашкин, Г.П.Мотулевич. ЖЭТФ, 57, 1054, 1969; Препринт ФИАН, №76, 1, 1969.

[4] И.Д.Маш. Труды ФИАН, 82, 3, 1975.

[5] А.И.Головашкин, И.Д.Маш, Г.П.Мотулевич. Краткие сообщения по физике, №9, 51, 1970.

[6] В.Э.Милн. Численный анализ. М., ИИЛ, 1951.