

ИНФРАКРАСНЫЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ FeGa_2Se_4

И.В. БОДНАРЬ¹, С.А. ПАВЛЮКОВЕЦ¹, А.Г. КАРОЗА²,
Г.Ф. СМЕРНОВА¹, Т.В. СМЕРНОВА³

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь
chemzav@bsuir.by

²Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси
пр-т Независимости, 68, г. Минск, 220072, Республика Беларусь

³Международный государственный экологический университет имени А.Д. Сахарова
ул. Долгобродская, 23, г. Минск, 220070, Республика Беларусь

Исследованы спектры отражения в области инфракрасного излучения, обусловленные колебаниями решетки в монокристаллах FeGa_2Se_4 , выращенных методом Бриджмена. Рассчитаны контуры однофононных спектров отражения и определены параметры фононов, эффективные ионные заряды и диэлектрические постоянные.

Ключевые слова: дисперсионный анализ Крамерса-Кронига, частоты продольных ω_{LO} и поперечных ω_{TO} фононов, диэлектрические постоянные, эффективные заряды.

Изучение колебательных спектров сложных полупроводниковых соединений в далекой ИК области дает информацию не только об оптических модах, но и позволяет решать проблемы структуры и динамической теории кристаллической решетки.

В данной работе впервые представлены результаты исследования колебательных спектров отражения монокристаллов FeGa_2Se_4 в области инфракрасного излучения.

Монокристаллы FeGa_2Se_4 получены прямым сплавлением элементов высокой степени чистоты методом Бриджмена [1]. Спектры ИК отражения измерены на Фурье-спектрометре FIR-30 в области частот $500\text{--}50\text{ см}^{-1}$ при комнатной температуре с разрешением $2\text{--}4\text{ см}^{-1}$.

Тройное соединение FeGa_2Se_4 кристаллизуется в кубической решетке с пространственной группой D_{2d}^1 ($P\bar{4}2m$). Исследуемое соединение является изоструктурным аналогом $\alpha\text{-CdIn}_2\text{Se}_4$. Решетка FeGa_2Se_4 может быть получена из решетки цинковой обманки путем заполнения четырех металлических узлов последней одним атомом Fe^{2+} и двумя атомами Ga^{3+} (один узел остается пустым); в элементарной ячейке содержится 8 атомов и 16 валентных штрихов.

На основании теоретико-группового анализа в центре зоны Бриллюэна должны наблюдаться 2 акустические моды и 13 оптических мод следующих симметрий [2]:

$$\Gamma = 2A_1 + 2A_2 + B_1 + 4B_2 + 6E$$

Согласно правилам отбора, колебательная мода симметрии A_2 является неактивной как в ИК, так и КРС спектрах. Все остальные моды как акустические, так и оптические являются активными в спектрах КРС. ИК активными являются моды симметрии B_2 и E . В симметриях B_2 и E по одной моде акустической, а все остальные моды оптические.

На рис. 1 представлены спектры ИК отражения для монокристаллов FeGa_2Se_4 , где в исследуемой области частот четко проявляются десять полос отражения.

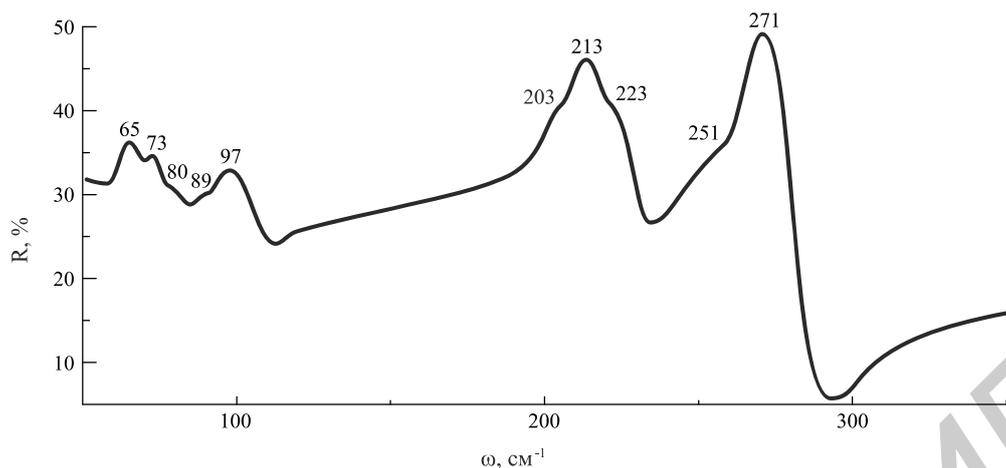


Рис. 1. ИК спектр отражения монокристаллов FeGa₂Se₄

Полученные спектры ИК отражения обрабатывали методом последовательного дисперсионного анализа Крамерса-Кронига [3], по которому были определены основные термодинамические параметры монокристаллов FeGa₂Se₄ (табл. 1).

Табл. 1. Параметры оптических фононов и эффективных зарядов

№ моды	$\omega_{LO}, \text{см}^{-1}$	$\omega_{TO}, \text{см}^{-1}$	g_n	S_n	ϵ_∞	ϵ_0	$\frac{e_s^*}{Z_{\text{эфф}}e}$	$\frac{e_s^*}{Ze}$	$\frac{e_B^*}{Ze}$
1	281	265	8	0,008	$\epsilon_0 = 1,11$ ϵ_∞	9,3	0,72	0,84	-2,90
2	256	244	6	0,007					
3	229	221	4	0,005					
4	217	209	4	0,005					
5	205	200	2,5	0,003					
6	105	93	6	0,018					
7	89	87	1	0,003					
8	81	79	1	0,003					
9	75	71	2	0,008					
10	67	61	3	0,014					

Полученные результаты свидетельствуют о том, что в спектрах ИК отражения выявлены все колебательные моды, которые вносят основной вклад в ϵ_∞ , а также определены эффективные заряды, которые отражают специфические особенности кристаллической структуры монокристаллов FeGa₂Se₄.

Список литературы

1. Боднарь И.В., Викторов И.А., Павлюковец С.А. // Сб. докл. Междунар. науч. конф. «Актуальные проблемы физики твердого тела». Минск, 20–23 октября 2009 г. С. 144–147.
2. Neumann H., Kissinger W., Lévy F. et al. // Crys. Res. Tech. 1990. Vol. 25. № 12. P. 1455–1459.
3. Бурлаков В.М., Рзаев Д.А., Пырков В.Н. Методика расчета оптических характеристик из спектров ИК отражения монокристаллов. Троицк, 1985.