

## ИНФРАКРАСНЫЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$

И.В. БОДНАРЬ<sup>1</sup>, С.А. ПАВЛЮКОВЕЦ<sup>1</sup>, А.Г. КАРОЗА<sup>2</sup>,  
Г.Ф. СМИРНОВА<sup>1</sup>, Т.В. СМИРНОВА<sup>3</sup>

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

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

<sup>3</sup>Международный 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  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$ , 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  $\omega_{\text{LO}}$  и поперечных  $\omega_{\text{TO}}$  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  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$  в области инфракрасного излучения.

Монокристаллы  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$  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  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$  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  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$  может быть получена из решетки цинковой обманки путем заполнения четырех металлических узлов последней одним атомом  $\text{Fe}^{2+}$  и двумя атомами  $\text{Ga}^{3+}$  (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  $\text{FeGa}_2\text{Se}_4$ , где в исследуемой области частот четко проявляются десять полос отражения.

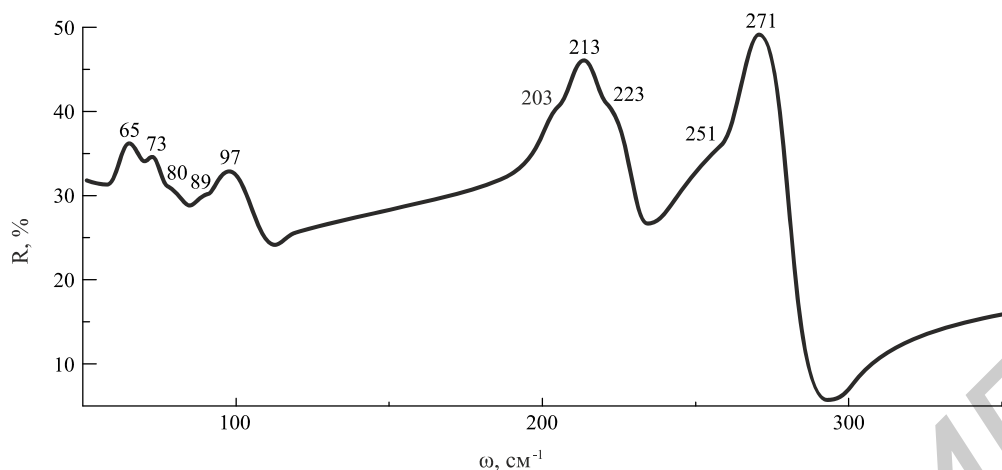


Рис. 1. ИК спектр отражения монокристаллов FeGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>

Полученные спектры ИК отражения обрабатывали методом последовательного дисперсионного анализа Крамерса-Кронига [3], по которому были определены основные термодинамические параметры монокристаллов FeGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> (табл. 1).

Табл. 1. Параметры оптических фононов и эффективных зарядов

№ моды	$\omega_{LO}, \text{см}^{-1}$	$\omega_{TO}, \text{см}^{-1}$	$g_n$	$S_n$	$\epsilon_\infty$	$\epsilon_0$	$\frac{e_s^*}{Z_{\text{эфф}}e}$	$\frac{e_s^*}{Ze}$	$\frac{e_B^*}{Ze}$
1	281	265	8	0,008	$\epsilon_0 = 1,11$ $\epsilon_\infty$	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  $\epsilon_\infty$ , а также определены эффективные заряды, которые отражают специфические особенности кристаллической структуры монокристаллов FeGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>.

#### 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.