

W₁₈O₄₉ – НОВЫЙ ПРОЗРАЧНЫЙ ПРОВОДНИК С ЭКРАНИРОВАНИЕМ В ИК-ДИАПАЗОНЕ

Д.С. Федосеев, С.В. Гранько, Д.Б. Мигас

С помощью методов из первых принципов исследованы электронные и оптические свойства субстехиометрического оксида вольфрама (W₁₈O₄₉). Установлено, что это соединение является вырожденным полупроводником, так как уровень Ферми находится в зоне проводимости. Особенностью энергетического спектра W₁₈O₄₉ является наличие локализованного состояния в запрещенной зоне, вызванного формированием биполяронов из-за взаимодействия двух соседних атомов

вольфрама, и, как следствие, локализацией заряда. Расчет коэффициентов оптического поглощения и отражения указывает на наличие значительного поглощения и отражения при энергии фотонов менее 1 эВ, вызванного свободными носителями заряда с концентрацией $\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$, за которым следует хорошо видимый пик около 1,1 эВ, обусловленный переходами с биполярного состояния на свободные состояния в зоне проводимости. В районе энергий фотонов 1,2 – 2,8 эВ значения коэффициентов оптического поглощения и отражения падают практически до нуля, указывая на окно прозрачности в видимом диапазоне у $W_{18}O_{49}$. Для энергий фотонов, превышающих 3,0 эВ, происходит интенсивное поглощение за счет межзонных переходов. Таким образом, $W_{18}O_{49}$ представляет собой прозрачный в видимом диапазоне проводник, у которого наблюдается экранирование в ИК диапазоне за счет переходов, использующих биполярные состояния.