

или, учитывая второй член в уравнении (11),

$$x_1 \approx I_D \frac{\exp \{(U - 2\delta - \Delta)/4\}}{1 - (4\gamma/3e) \exp \{-\Delta/2 - \delta\}}. \quad (17)$$

Как видно из (17), в случае, когда $\alpha_n \neq \alpha_p$, эффективная термоэдс, измеряемая в опыте, будет иметь дополнительную температурную зависимость с энергией активации

$$\varepsilon_{th} = U - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2 - \varepsilon_g/2. \quad (18)$$

Появление этой температурной зависимости обязано изменению положения границы, разделяющей области p - и n -типа проводимости.

Автор глубоко благодарен В. Л. Бонч-Бруевичу за внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Roosbroeck W. van, Casey H. C., Jr. // Phys. Rev. 1972. B5. P. 2154—2166. [2] Stöckmann F. // Photoconductivity Conf./Ed. R. G. Breckenridge. 1956. N 4. P. 269—283. [3] Mott N. F., Davis E. A., Street R. A. // Phil. Mag. 1975. 32. P. 961—981. [4] Cong van. // J. Phys. Chem. Sol. 1965. 36. P. 1237—1240. [5] Дрожов Ю. П. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3, Физ. Астрон. 1985. 26, № 2. С. 97—100.

Поступила в редакцию
18.04.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1987. Т. 28, № 4

УДК 669.01+535.33

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОКСИ БЕРИЛЛИЯ

И. В. Китык, В. Н. Колобанов, В. В. Михайлин

(кафедра теоретической физики)

Кристаллы окиси бериллия — широкозонные ионные диэлектрики со структурой вюрцита (симметрия C_{6v}) — обладают уникальными свойствами, такими как высокая прозрачность в области вакуумного ультрафиолета, радиационная стойкость, механическая прочность и высокая теплопроводность, и являются перспективными для ряда областей науки и техники.

В настоящее время существует лишь две работы по расчету энергетической зонной структуры данных кристаллов, выполненные современными методами: методом расширенной элементарной ячейки [1] и методом псевдопотенциала [2].

В настоящей работе сделана попытка построения количественной схемы энергетических зон кристалла BeO , согласующейся с экспериментальными данными, в частности с оптическими спектрами в области межзонных переходов. С этой целью проведены измерения спектров отражения от скола монокристалла BeO , изготовленного в Институте геологии и геофизики СО АН СССР по методике [3].

Измерения проводились на ускорителе электронов Физического института АН СССР С-60 [4]. Экспериментальная установка в канале синхротронного излучения [5] собрана на базе монохроматора нормального падения без входной щели по модифицированной схеме Водсворта с горизонтальной плоскостью дисперсии. В монохроматоре использована сферическая дифракционная решетка радиуса кривизны 2 м с концентрацией энергии в области 1500 А, нарезанная на алюми-

нии (1200 штрихов на 1 мм). Спектральное разрешение монохроматора ограничено горизонтальным размером изображения сгустка электронов с излучающей точки орбиты и составляет 10 Å при ширине выходной щели 1,4 мм.

Исследуемый образец помещался в азотный криостат, конструкция которого позволяла измерять спектры отражения при почти нормальном падении света на образец (угол падения не более 10°) и спектры возбуждения люминесценции при температуре образца от 80 до 400 К и вакууме 10^{-6} Тор. Регистрация сигнала осуществлялась с помощью ФЭУ-106, работавшего в режиме счета фотонов.

Установка оборудована автоматизированной системой регистрации на базе ЭВМ PDP-11/05, связь с которой осуществлялась аппаратурой в стандарте КАМАК. Измеренные спектры обрабатывались с помощью специальной программы, которая давала возможность учитывать рассеянный свет, проводить сглаживание и нормировку на спектр возбуждения салицилата натрия, обладающего постоянным квантовым выходом в рабочей области спектра [6], а также преобразовывать измеренные спектры в соответствии с градуировкой монохроматора и выводить их на графопостроитель или печатающее устройство.

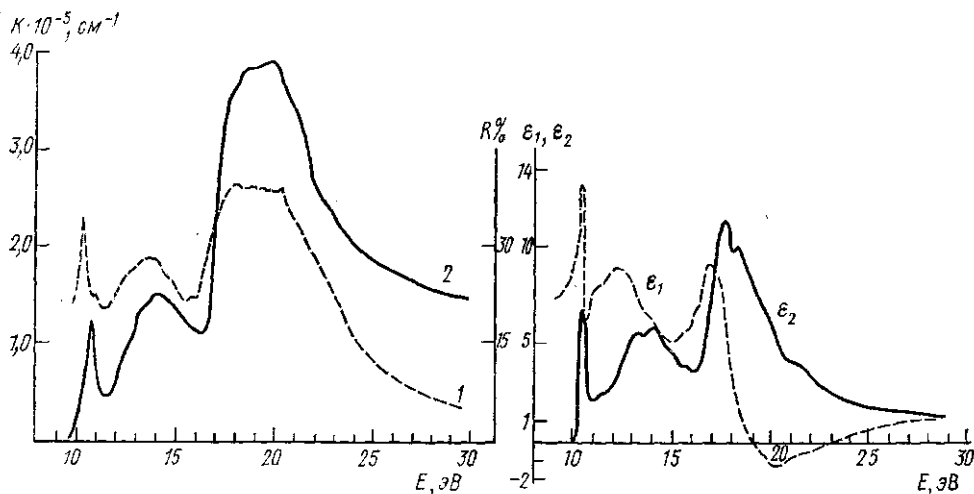


Рис. 1. Спектры отражения (1) и поглощения (2) скола монокристалла BeO

Рис. 2. Спектры действительной части $\epsilon_1(E)$ (пунктир) и мнимой части $\epsilon_2(E)$ (сплошная линия) диэлектрической проницаемости BeO

На рис. 1, а приведен спектр отражения скола монокристалла окиси бериллия, измеренный при комнатной температуре в области энергий падающих фотонов 8—30 эВ со спектральным разрешением не хуже 10 Å. Первый максимум в спектре отражения в области 10,35 эВ, наиболее вероятно, соответствует созданию экситона в Γ -точке [1, 2, 7]. Второй, менее интенсивный максимум при 10,5 эВ можно связывать с созданием экситон-фононного комплекса либо со вторым членом экситонной серии [7]. Ширина запрещенной зоны BeO $E_g = 10,63$ эВ [8, 9]. Структура спектра отражения в области энергий фотонов выше 10,63 эВ соответствует переходам электронов из валентной зоны в зону проводимости и определяется объединенной

межзонной плотностью состояний [8]. Следует отметить хорошее соответствие измеренного спектра с данными других авторов [10, 11] и особенно со спектрами отражения кристалла BeO с различной поляризацией падающего света [9, 11].

Из спектра отражения по дисперсионным соотношениям Крамерса—Кронига вычислены оптические постоянные окиси бериллия в области фундаментального поглощения. На рис. 1, б приведены рассчитанные спектры поглощения $K(E)$, а на рис. 2 — действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 частей диэлектрической проницаемости.

Расчет энергетической зонной структуры проводился по методу псевдопотенциала, который дает возможность обойти вычислительные трудности, характерные для расчетов «из первых принципов». Для наших целей эффективным является метод эмпирического псевдопотенциала, в котором параметры зон в исследуемом интервале энергий получаются на основе подгонки фурье-компонент кристаллического псевдопотенциала под оптические спектры изучаемых кристаллов. Основным недостаток всех расчетов этим методом заключается в том, что с одним псевдопотенциалом не удастся достичь хорошего описания одновременно валентной зоны и зоны проводимости. Поэтому важной является процедура подгонки существующих модельных псевдопотенциалов под экспериментальные данные. В качестве базисного выбран модельный псевдопотенциал, введенный в работе [12]:

$$V_{ps}^{(l,v)} = -\frac{Z_v}{R} [c_i^{(os)} \operatorname{erf}[(\alpha_i^{(os)})^2 R] + \sum_{i=1}^3 (A_i^{(l)} + R^2 A_{i+3}^{(l)}) \exp(-\alpha_i^{(l)} R^2)], \quad (1)$$

где первое слагаемое соответствует основной части конкретного атомного псевдопотенциала v -го сорта, а второе — вкладу валентных электронов с орбитальным числом l , параметры Z_v , $c_i^{(os)}$, $\alpha_i^{(os)}$, $A_i^{(l)}$ и $\alpha_i^{(l)}$ являются коэффициентами псевдопотенциала и протабулированы для всех элементов периодической системы в работе [12].

В качестве базиса секулярного уравнения использовались плоские волны, число которых варьировалось с целью получить сходимость собственных значений энергии с точностью не хуже 0,001 Ry. Формфакторы в этом базисе получались путем преобразования Фурье в \mathbf{k} -пространство с одновременной локализацией соответствующих псевдопотенциалов:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_i | V_{ps}^{(v)} | \mathbf{k}_j \rangle &= \frac{4\pi}{\Omega} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \times \\ &\times \int_0^\infty j_l(|\mathbf{k}_i| R) j_l(|\mathbf{k}_j| R) V_{ps}^{(l,v)}(R) R^2 dR - \\ &- \frac{4\pi Z_v}{\Omega q^2} \sum_{i=1}^2 c_i^{(os)} \exp\left(-\frac{q^2}{4\alpha_i^{(os)}}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

Ω — объем зоны Бриллюэна, \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_j — векторы обратной решетки для данного формфактора, $P_l(x)$ — полиномы Лежандра, θ — угол между векторами \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_j , $j_l(|\mathbf{k}_i| R)$ и $j_l(|\mathbf{k}_j| R)$ — сферические функции Бесселя l -го порядка. Интеграл (2) вычислялся по методу Симпсона с точно-

стью сходимости не хуже 0,001 Ry. Для построения кристаллического псевдопотенциала проводились расчеты структурных факторов

$$S_\nu(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_m \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_m^{(\nu)}), \quad (3)$$

где N — количество атомов в элементарной ячейке, $\mathbf{r}_m^{(\nu)}$ — координаты m -го атома ν -го сорта, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j$. Из принципа суперпозиции недеформируемых псевдопотенциалов искомым кристаллический псевдопотенциал можно записать в виде

$$\langle \mathbf{k}_i | V^{(cr)} | \mathbf{k}_j \rangle = \sum_{\nu=1}^N S^{(\nu)}(\mathbf{q}) \langle \mathbf{k}_i | V^{(\nu)} | \mathbf{k}_j \rangle. \quad (4)$$

Формфакторы, определяемые соотношением (4), являются матричными элементами секулярного уравнения для нахождения собственных значений в различных точках зоны Бриллюэна, которое имеет вид

$$\left\| \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_j}{2m} - E \right) \cdot \delta_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j} + \langle \mathbf{k}_i | V^{(cr)} | \mathbf{k}_j \rangle \right\| = 0. \quad (5)$$

С целью факторизации уравнения (5) проведен теоретико-групповой анализ симметрии группы C_{6v} , что позволило разложить (5) на несколько секулярных уравнений с матрицами, размеры которых не превышают 25×25 .

Полученные собственные значения энергии и волновые функции в 240 различных точках зоны Бриллюэна являлись исходными для построения псевдопотенциала с учетом экранирования. С этой целью проводился расчет пространственного распределения электронной плотности по методике [13], на основе которого рассчитывались поправки экранирования: пуассоновская [14] и обменно-корреляционная [15], которые в дальнейшем вычитались из уравнения (5).

Для построения количественной энергетической зонной схемы кристаллов ВеО с учетом экспериментальных данных проводилось сравнение объединенной межзонной плотности состояний $J_{c,v}(E)$, получаемой из экспериментальных данных и построенной из зонной схемы по соотношению

$$J_{c,v}(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} [E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k})]|}, \quad (6)$$

где c и v — состояния в валентной зоне и зоне проводимости, между которыми происходят межзонные переходы. Интеграл в (6) вычисляется по зоне Бриллюэна.

С целью подгонки кристаллических формфакторов проводилось разбиение обоих спектров $J_{c,v}(E)$ для определения вклада отдельных переходов по методике [16]. Из сравнения экспериментального и теоретического спектров $J_{c,v}(E)$ идентифицировались основные переходы.

В таблице приведены основные зонные параметры, полученные без подгонки и с подгонкой. Там же даны результаты других теоретических расчетов и экспериментальные данные.

Как видно из данных, приведенных на рис. 3, а и в таблице, зонная энергетическая структура, полученная в настоящей работе, качественно согласуется с рассчитанной в [2]. В то же время ширина запрещенной зоны, полученная в [2], оказалась значительно ниже (на 3,6 эВ) по сравнению с экспериментальной величиной энергетической щели [8, 9, 17]. С другой стороны, метод комбинированной расширенной элемен

Зонные параметры	Без коррекции с экспериментальными данными	С коррекцией	Теория		Эксперимент
			[1]	[2]	
E_g , эВ — энергетическая щель	11,4	10,8	11,7	7,0	10,63 [8,9] 10,7 [17]
ΔE_{v1} , эВ — ширина верхней валентной зоны	8,4	8,0	4,2	7,6	9 эВ [17]
ΔE_{v2} , эВ — ширина нижней валентной зоны	4,3	4,1	4,9	3,8	—

тарной ячейки [1], значительно улучшив параметры энергетической щели, сильно занижил значения ΔE_{v1} , что также затрудняет получение надежных количественных параметров данных соединений. По нашему мнению, именно комплексный подход, включающий, с одной стороны,

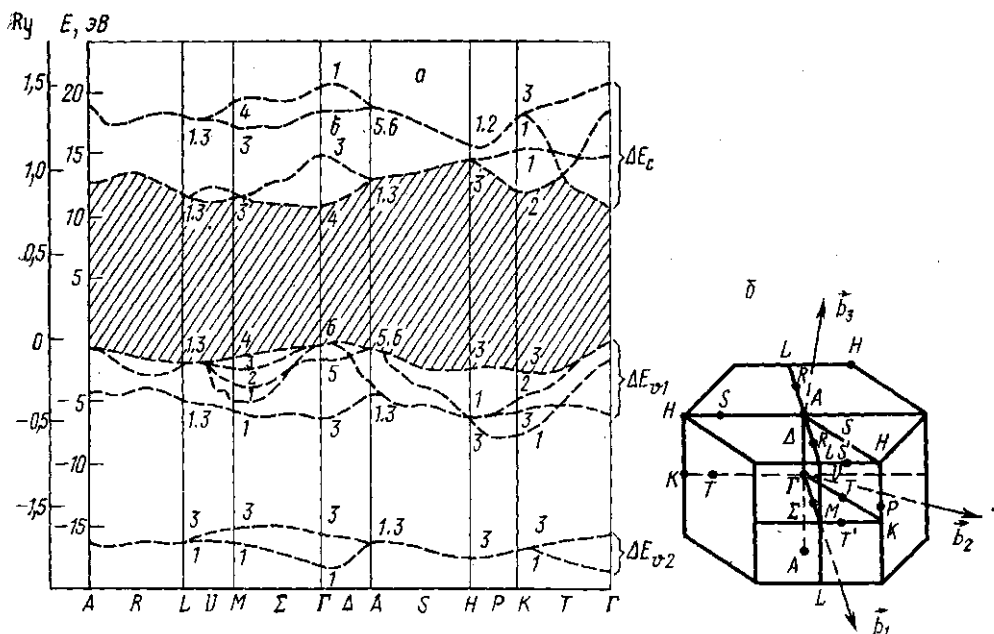


Рис. 3. Энергетическая зонная структура BeO (а); зона Бриллюэна BeO и расположение симметричных точек и линий (б)

теоретические расчеты «из первых принципов», а с другой — учет экспериментальных данных, является наиболее эффективным для получения надежных количественных данных исследуемых кристаллов.

Для идентификации полученных спектров нами проводилось разложение плоских волн в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна по базису атомных орбиталей. В результате удалось установить генетическую природу энергетических зон. Нижняя валентная зона ΔE_{v2} образована $2s$ -орбиталями кислорода. Верхняя валентная зона ΔE_{v1} состоит на 70% из $2p$ -орбиталей кислорода и на 30% из $2s$ -орбиталей бериллия. Нижняя часть зоны проводимости ΔE_c на 60% состоит из $2s$ -орбиталей бериллия и на 40% из $2s$ -орбиталей кислорода, а верх зоны проводимости сформирован антисвязывающими $2p$ -орбиталями бе-

риллия. Структура оптических спектров в области 19–22 эВ определяется переходами по симметричным линиям НКГ между верхней валентной зоной ΔE_{v1} и верхней частью зоны проводимости ΔE_c ; в области 14 эВ — по симметричным линиям АНК между ΔE_{v1} и нижней частью ΔE_c , а в областях 12,8 и 13,5 эВ — по линиям симметрии ГМА и ЛГ соответственно между ΔE_{v1} и нижней частью зоны проводимости ΔE_c .

Таким образом, полученная в данной работе энергетическая зонная структура кристаллов ВеО может быть основой для проведения дальнейших количественных оценок различных физических свойств данных кристаллов.

Авторы выражают благодарность А. Н. Васильеву за обсуждение данной работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Васильев А. Н., Топорнин К. Б., Эварестов Р. А. // Опт. и спектр. 1980. 48, № 2. С. 277–282. [2] Chang K. J., Froyen S., Cohen M. // J. Phys. C. 1983. 16. P. 3475–3487. [3] Маслов В. А. и др. // VI Междунар. конф. по росту кристаллов: Расширенные тезисы. М., 1980. Т. 3. С. 268–269. [4] Якименко М. Н. // УФН. 1974. 114, № 1. С. 55–56. [5] Александров Ю. М., Колобанов В. Н., Махов В. Н., Сырейщикова Т. И., Якименко М. Н. Препринт ФИАН СССР № 139. М., 1980. [6] Samson J. A. R. Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy. N. Y., 1967. [7] Walker W. C., Roessler D. M. // Phys. Rev. Lett. 1968. 20, N 16. P. 847–849. [8] Александров Ю. М. и др. // Письма в ЖТФ. 1981. 7, № 6. С. 343–346. [9] Иванов В. Ю. и др. // Тр. VI Всесоюз. совещ. по использованию синхротронного излучения. Новосибирск, 1984. С. 291–293. [10] Roessler D. M., Walker W. C., Loh E. // J. Phys. Chem. Solid. 1969. 30, N 1. P. 157–159. [11] Freeouf J. L. // Phys. Rev. 1973. B7, N 8. P. 3810–3830. [12] Bachelet G. B., Haman D. R., Schlüter M. // Phys. Rev. 1982. B26, N 8. P. 4199–4212. [13] Chadi D. J., Cohen M. L. // Ibid. 1973. B8, N 11. P. 5747–5763. [14] Харрисон У. Теория твердого тела. М., 1972. [15] Perdew J., Zunger A. // Phys. Rev. 1981. B23, N 10. P. 5048–5058. [16] Соболев В. В. Энергетические зоны кристаллов группы А^{IV}. Кишинев, 1979. [17] Сорокин О. М., Бланк В. А. // Опт. и спектр. 1976. 41, № 2. С. 278–283.

Поступила в редакцию
18.04.86

ГЕОФИЗИКА

УДК 621.378

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРА МОРСКОГО ВОЛНЕНИЯ

А. Л. Кузьминский, В. И. Шмальгаузен

(кафедра общей физики и волновых процессов)

В настоящее время среди методов лазерного зондирования морской поверхности наибольшее распространение получила фазовая профилометрия [1]. Как отмечается в работе [2], этот метод имеет некоторые ограничения. В работах [3, 4] предложена методика определения параметров модельного пространственного спектра поверхностного волнения, основанная на анализе оптического сигнала, отраженного от зеркальных площадок. Эта методика, однако, не позволяет определять высоту волн, а также требует многократной смены направления движения самолета-лидара над участком морской акватории.

Настоящая работа предлагает новый подход к анализу картины бликов. Предлагается методика определения параметров модельного