

Расчет оптических функций кристаллов CuIn_5Se_8 с помощью CSA алгоритма.

Левченко Сергей Вячеславович

аспирант

Институт Прикладной Физики Академии Наук Молдовы, Кишинев MD 2028, Молдавия

e-mail : levenco@phys.asm.md

Кристаллы CuIn_5Se_8 (Cis1, Cis2) были выращены методом Бриджмена. Стехиометрический состав образцов для Cu:In:Se составляет 7.1: 32.7: 60.1 и 6.5: 33.2: 60.4 атомных процента для Cis1 и Cis2 соответственно. Спектры мнимой (ϵ_2) и действительной (ϵ_1) части диэлектрической проницаемости кристаллов были получены с помощью эллипсометрического метода в области энергий 0.8–4.5 эВ при температуре 300 К.

На рис.1 представлены экспериментальные данные диэлектрической проницаемости для кристалла Cis1 с лучшей стехиометрией по Cu. Для интерпретации спектров были использовано поведение функции межзонной плотности состояний вблизи особенности Ван-Хова, т.е. вблизи критических точек [1]. Параметры оптических функций, рассчитывались одновременно по ϵ_1 и ϵ_2 на всем интервале энергий с использованием CSA-алгоритма[2], в основу которого положен критерий Метрополиса. Определены энергии, соответствующие различным межзонным переходам, и получено удовлетворительное согласие с экспериментом (рис.1). Относительная ошибка составила 1-2% и 2-7% для ϵ_1 и ϵ_2 соответственно. Переход с наименьшей энергией E_0 был описан критической точкой тип 3D, тогда как межзонные переходы E_{1A} и E_{1B} , происходящие при больших энергиях, типом 2D. Спектральные зависимости показателя преломления $n^*(E)$, коэффициент поглощения $k(E)$ и коэффициент отражения $R(E)$ при нормальном угле падения кристаллов CuIn_5Se_8 также были определены.

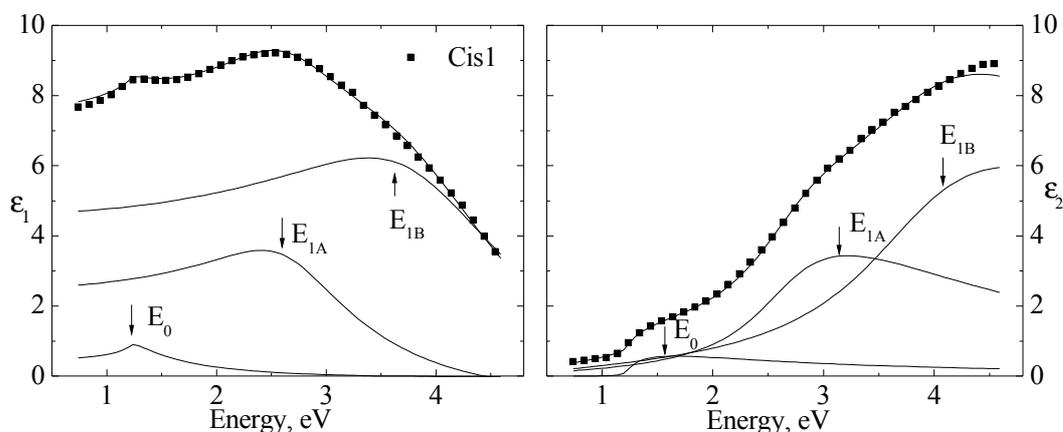


Рис. 1 Действительная (ϵ_1) и мнимая (ϵ_2) часть диэлектрической проницаемости (квадраты) в зависимости от энергии для CuIn_5Se_8 кристалла при 300К. Теоретическая (сплошная) кривая получена из совместного расчета спектра ϵ_1 и ϵ_2 с помощью CSA-алгоритма. Индивидуальные вклады от E_0 , E_{1A} и E_{1B} переходов в функции ϵ_1 и ϵ_2 обозначены стрелками.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке the World Federation of Scientists.

Литература

[1] S. Adachi, *Phys. Rev. B* **41**, 1003 (1990).

[2] A. Corana, M. Marchesi, C. Martini, and S. Ridella, *ACM T.Math. Software* **13**, 262 (1987).