

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЕРДОГО И ЖИДКОГО ИТТЕРБИЯ ИЗ ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Л. А. Акашев, Н. А. Попов*, В. Г. Шевченко

УДК 535.328/.329:546.668

Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской АН,
620990, Екатеринбург, Россия; e-mail: n168@mail.ru

(Поступила 17 мая 2019)

Эллипсометрическим методом исследованы оптические свойства неокисленной поверхности поликристаллической пленки иттербия в спектральном диапазоне 0.4–2.6 мкм. По измеренным показателям преломления и коэффициентам поглощения пленки рассчитаны дисперсионные зависимости световой проводимости σ , коэффициенты отражения R , мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости ϵ_1 и ϵ_2 , функции характеристических потерь энергии электронов $Im(\epsilon^{-1})$. С использованием результатов измерений в ИК области спектра по двухполосной модели проводимости рассчитаны электронные характеристики иттербия в твердом и жидком состояниях.

Ключевые слова: эллипсометрия, оптические свойства редкоземельных металлов, иттербий, характеристики электронов проводимости.

The optical properties of the non-oxidized surface of a polycrystalline ytterbium film were investigated by an ellipsometric method in the spectral range of 0.4–2.6 μm . The dispersion dependences of optical conductivity σ , reflectivity R , imaginary and real parts of the dielectric permittivity ϵ_1 and ϵ_2 , and the function of characteristic losses of electron energy $Im(\epsilon^{-1})$ were calculated from the measured values of refractive index and absorption coefficient. Using the results of measurements in the infrared spectral region and a two-band conductivity model, the electronic characteristics of ytterbium in the solid and liquid states were calculated.

Keywords: ellipsometry, optical properties of rare-earth metal, ytterbium, conduction electron characteristics.

Введение. Металлический иттербий и его соединения широко применяются в науке и технике, в частности при производстве специальных сплавов на основе алюминия. В смеси с другими редкоземельными металлами (РЗМ) иттербий используется как раскислитель и модификатор при производстве стали. Различные высокоэффективные магнитные сплавы изготавливаются с применением иттербия. При облучении иттербия нейтронами в ядерном реакторе он частично превращается в гафний-178, который может использоваться как миниатюрный источник энергии в различных приборах. Металлический иттербий является катализатором многих процессов в химической и нефтеперерабатывающей отрасли. В настоящее время во всем мире проводятся исследования для определения дальнейшего использования иттербия и его соединений.

Достоверные сведения об особенностях электронного спектра металлов и сплавов могут быть получены из спектроскопических измерений. Оптические исследования металлов и сплавов в ИК области спектра позволяют определить характеристики электронов проводимости и установить их связь с электрическими свойствами металла [1]. В свою очередь оптические спектры видимого диапазона помогают охарактеризовать межзонные и внутризонные переходы, обусловленные $3d$ - и $4s$ -электронами в d -металлах, а также $4f$ -, $5d$ - и $6s$ -электронами — в редкоземельных металлах (РЗМ). Довольно сложная электронная структура РЗМ определяет их уникальные магнитные, электрофизи-

DETERMINATION OF OPTICAL PROPERTIES AND ELECTRONIC CHARACTERISTICS OF SOLID AND LIQUID YTTERBIUM USING ELLIPSOMETRY

L. A. Akashev, N. A. Popov*, V. G. Shevchenko (Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620990, Russia; e-mail: n168@mail.ru)

ческие и другие физико-химические свойства. В случае фазовых переходов, например, с изменением параметров решетки, характера ее симметрии и магнитного упорядочения можно ожидать существенных преобразований как в электронной структуре этих веществ, так и в их оптических спектрах.

Известно, что металлический иттербий в зависимости от термодинамических условий может проявлять необычные электрофизические свойства. Так, плавление иттербия (и европия) сопровождается наиболее сильным по сравнению с другими лантаноидами возрастанием удельного электросопротивления. Вместе с тем Yb и Eu обладают отрицательным температурным коэффициентом удельного электросопротивления в жидком состоянии [2]. Интересен тот факт, что при давлениях 1.3—4.0 ГПа в условиях статического сжатия в иттербии имеет место переход металл—полупроводник [3], а при более высоких (от 4 до 98 ГПа) — полиморфные фазовые превращения из границированной решетки (ГЦК) в объемно-центрированную (ОЦК) и далее в гексагональную плотноупакованную (ГПУ) [4]. Сложное поведение этого металла объясняют деформацией энергетических зон электронного спектра при сжатии и возникновением в нем энергетической щели.

Важным источником информации в исследованиях его электронной структуры послужили оптические измерения. Первые эксперименты по оптическим свойствам поликристаллических пленок иттербия в интервале 0.5—5.0 эВ, проведенные в [5], выявили поразительное сходство частотной зависимости коэффициента отражения щелочноземельных металлов Ba и Sr со спектрами Eu и Yb. Близость химических, физических и структурных свойств этих металлов позволяет сделать вывод о почти одинаковом строении их внешних энергетических зон. В спектрах отражения всех указанных металлов обнаружен максимум вблизи 1.6 эВ. Различия в оптическом поглощении связывали с особенностями, вызванными переходами с $4f$ -уровней. Позднее [6] в оптических спектрах пленок иттербия при энергиях 1—11.6 эВ наблюдались максимумы не только вблизи 1.6 эВ, но и при 2.7 эВ, что связано с переходами в системе $4f$ — $5d$ -уровней. При этом теоретические расчеты подтверждали наличие данных структур [7]. Особенности оптических спектров пленок иттербия, касающиеся ближней УФ области, отражены в более поздней работе [8] и хорошо согласуются с указанными выше результатами. Электронную структуру и лазерно-индуцированные оптические переходы атомов иттербия продолжают активно изучать с помощью современных квантово-химических подходов [9] в связи с возрастающим интересом к этому элементу в физике атомов при низких температурах.

Такие оптические параметры, как коэффициенты теплового излучения и отражения металлического иттербия в твердом и жидком состояниях, могут представлять интерес в расчетах интенсивности теплового излучения при синтезе и эксплуатации его сплавов, например, лигатур Al-Yb, магниевых сплавов ZK60-Yb [10] или сплавов NiCrAlYb, используемых в качестве связующих слоев жаростойких покрытий [11]. Сведения о поглощательной способности твердых и жидких металлов также важны в оптимизации методов их селективного лазерного плавления [12]. В сочетании с теорией почти свободных электронов Друде оптические измерения дают информацию о концентрации электронов проводимости и частоте колебаний плазмонов, что представляет интерес в расчетах теплоемкости и тепло-электропроводности металлов и сплавов. В данной работе проведены сравнительный анализ оптических свойств и расчет электронных характеристик иттербия в твердом и жидком (поликристаллическом) состояниях.

Методика эксперимента. Оптические постоянные иттербия в конденсированном и жидком состояниях измерены эллипсометрическим методом Битти (эллипсометр ЛЭФ-3М, спектральный диапазон 0.4—2.6 мкм) [13]. Установка для эллипсометрических измерений поверхности жидкого иттербия (рис. 1) состоит из источника света (галогенной лампы) с монохроматором, эллипсометра, вакуумной камеры с системой откачки до 10^{-4} — 10^{-5} Па и возможностью напуска инертных газов, снабженной нагревателем с термопарой. Вакуумная камера сконструирована так, чтобы ее окна располагались перпендикулярно лучу света, падающему на образец под углом $\varphi = 82^\circ$. Результаты измерений оптических постоянных жидкого иттербия на данной установке представлены в [14].

Оптические свойства твердого металлического иттербия измерены на воздухе при таком же угле падения $\varphi = 82^\circ$ с использованием геометрии Кречмана [15]. Сначала тонкую пленку иттербия получали методом вакуумного термического испарения с вольфрамового испарителя на установке ВУП-5М. В качестве подложки выбрана грань треугольной призмы из оптического стекла (рис. 2). Согласно результатам исследований с использованием электронной растровой микроскопии, толщина пленки иттербия 650—700 нм. С внешней стороны она сразу же в условиях вакуума покрывалась пассивирующим слоем алюминия, позволяющим пленке иттербия оставаться не окисленной на воздухе продолжительное время (до нескольких недель). Рентгенофазовый анализ показал, что полученные

в данных условиях поликристаллические пленки иттербия имеют α -(ГЦК) решетку. Таким образом, эллипсометрические измерения проводили для луча, отраженного с внутренней неокисленной стороны пленки иттербия (рис. 2). Погрешность измерений оптических постоянных иттербия 2—4 %.

При угле падения $\varphi_0 = 45^\circ$ эллипсометрические параметры Δ и ψ определяют для модели стекло/исследуемая пленка. При $\varphi_0 > 45^\circ$ (как на рис. 2) истинный угол падения луча света на образец φ_1 определяют из закона Снеллиуса:

$$n_0 \sin(\varphi_0 - 45^\circ) = n_1 \sin \alpha; \quad \varphi_1 = 45^\circ + \alpha, \quad (1)$$

где $n_0 = 1$ — показатель преломления воздуха; $n_1 = 1.51$ — показатель преломления стекла; α — угол преломления луча на границе воздух—стекло.

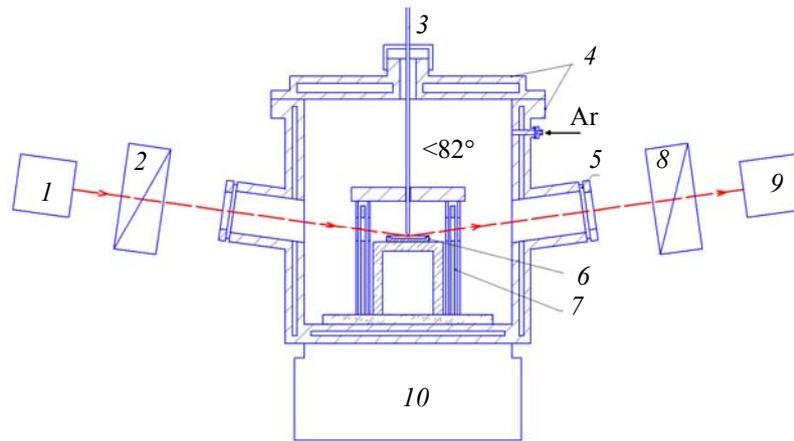


Рис. 1. Схема эллипсометрической установки для исследования оптических свойств жидкого иттербия: 1 — источник излучения с монохроматором ($\lambda = 0.4$ — 2.6 мкм); 2 — поляризатор эллипсометра; 3 — термопара; 4 — водоохлаждаемый корпус вакуумной камеры с крышкой; 5 — окошки из плавленного кварца; 6 — тигель с жидким металлом; 7 — нагреватель с молибденовыми экранами; 8 — анализатор эллипсометра; 9 — фотоприемник; 10 — система вакуумных насосов

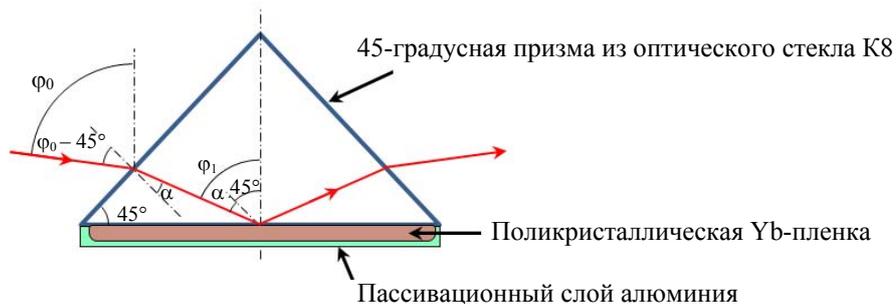


Рис. 2. Схема эллипсометрических измерений по геометрии Кречмана: φ_0 — угол падения в системе воздух—стекло; α — угол преломления на этой границе; φ_1 — истинный угол падения из стекла на пленку

Истинные значения эллипсометрических параметров Δ и ψ определяются по формулам [16]:

$$\operatorname{tg} \psi = \left(\frac{n_1^2 \cos(\varphi_0 - 45^\circ) + \sqrt{n_1^2 - \sin^2(\varphi_0 - 45^\circ)}}{n_1 \left[\cos(\varphi_0 - 45^\circ) + \sqrt{n_1^2 - \sin^2(\varphi_0 - 45^\circ)} \right]} \right)^2 \operatorname{tg} \psi_{\text{exp}}; \quad (2)$$

$$\Delta = \Delta_{\text{exp}} \pm 4\Psi_m \frac{(n_1^2 - 1) \sin^2(\varphi_0 - 45^\circ)}{\sqrt{n_1^2 + 1} \left[n_1^2 \cos(\varphi_0 - 45^\circ) + \sqrt{n_1^2 - \sin^2(\varphi_0 - 45^\circ)} \right]}, \quad (3)$$

где Δ_{exp} , Ψ_{exp} — измеренные Δ и Ψ ; Ψ_m — минимальная эллиптичность отраженного света при угле Брюстера $\varphi_B = \arctg n_1$:

$$\Psi_m = \left| \frac{\pi d_{\text{lay}} (n_1^2 - n_{\text{lay}}^2)(n_{\text{lay}}^2 - 1)}{\lambda n_{\text{lay}}^2 (n_1^2 - 1)} \sqrt{n_1^2 + 1} \right|, \quad (4)$$

где $n_1 = 1.51$ (стекло); n_{lay} , d_{lay} — показатель преломления и толщина переходного слоя воздух—стекло.

Т а б л и ц а 1. Оптические постоянные жидкого иттербия и пленки, полученной вакуумным термическим испарением

λ , мкм	Пленка		Жидкий Yb [14]		λ , мкм	Пленка		Жидкий Yb [14]	
	n	k	n	k		n	k	n	k
0.4	0.68	1.94	—	—	0.86	2.10	3.93	1.79	3.89
0.42	0.67	2.02	—	—	0.88	2.11	3.99	1.81	3.95
0.44	0.70	2.14	1.38	1.76	0.9	—	—	1.82	3.99
0.46	0.73	2.28	1.4	1.83	0.92	2.12	4.05	1.89	4.00
0.48	0.76	2.41	1.40	1.91	0.94	2.14	4.11	1.90	4.05
0.5	0.79	2.49	1.42	1.98	0.96	2.16	4.18	1.92	4.10
0.52	0.81	2.64	1.44	2.10	0.98	2.21	4.24	1.96	4.15
0.54	0.84	2.74	1.46	2.22	1	2.24	4.26	2.00	4.18
0.56	0.88	2.90	1.48	2.30	1.1	2.43	4.43	2.15	4.40
0.58	0.93	2.99	1.48	2.45	1.2	2.58	4.66	2.39	4.75
0.6	1.01	3.10	1.50	2.70	1.3	2.63	4.95	2.55	5.08
0.62	1.11	3.23	1.53	2.88	1.4	2.73	5.20	2.73	5.43
0.63	1.17	3.28	—	—	1.5	2.85	5.44	3.02	5.75
0.64	1.22	3.37	1.55	3.05	1.6	2.97	5.60	3.35	6.08
0.66	1.28	3.44	1.57	3.12	1.7	3.01	5.93	3.56	6.40
0.68	1.43	3.51	1.60	3.25	1.8	3.12	6.17	3.84	6.70
0.7	1.53	3.57	1.63	3.35	1.9	3.19	6.45	4.10	7.00
0.72	1.65	3.64	1.65	3.40	2	3.33	6.71	4.32	7.25
0.74	1.73	3.69	1.66	3.50	2.1	3.44	6.91	4.60	7.50
0.76	1.78	3.78	1.68	3.58	2.2	3.58	7.11	4.93	7.74
0.78	1.85	3.80	1.69	3.65	2.3	3.65	7.33	—	—
0.8	1.91	3.83	1.70	3.71	2.4	3.76	7.55	—	—
0.82	1.99	3.84	1.74	3.80	2.5	3.85	7.67	—	—
0.84	2.06	3.86	1.75	3.84	2.6	4.03	7.78	—	—

Примечание: λ — длина волны; n , k — показатели преломления и поглощения, входящие в уравнение для комплексного показателя преломления металла: $N = n - ik$, i — мнимая единица.

Результаты и их обсуждение. В табл. 1 приведены оптические постоянные для жидкого иттербия при 1120 К ($T_{\text{плав}} = 1097$ К) и пленки, напыленной на призму. Как видно, оптические постоянные в обоих случаях возрастают по мере увеличения λ . С использованием этих данных вычислены спектральные зависимости высокочастотной световой проводимости $\sigma(\omega)$ и отражения R (рис. 3):

$$\sigma(\omega) = nkc / \lambda, \quad (5)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (6)$$

где n — показатель преломления металла; k — коэффициент поглощения.

Световая проводимость σ — чувствительный параметр, характеризующий частотную зависимость межполосных переходов электронов в металле под действием света, а также их интенсивность. Она связана с мнимой частью комплексного показателя преломления, характеризующей “затухание” световой волны в веществе [1]. Поясним происхождение этого параметра. Из закона Ома

$$j = \sigma E, \quad (7)$$

где j — плотность электрического тока; E — напряженность электрического поля; $\sigma = 1/\rho$ — статическая проводимость; ρ — удельное электрическое сопротивление на постоянном токе. Световая (оптическая) проводимость $\sigma(\omega)$ — проводимость на частоте $\omega \sim 10^{12}—10^{16} \text{ с}^{-1}$ ($10^{12}—10^{16}$ Гц) электрического поля световой волны. Закон Ома в этом случае имеет вид

$$j(\omega) = \sigma(\omega)E(\omega). \quad (8)$$

Если $\omega = 0$, то имеем уравнение (7).

В дисперсионных зависимостях световой проводимости (рис. 3) как жидкого, так и твердого иттербия присутствует одна широкая полоса поглощения в области энергий фотонов 1—2 эВ, связанная, как указано выше, с переходами электронов в системе $5d—6s$ -полос. В связи с ограниченностью измеряемого диапазона вторая полоса при 2.7 эВ, установленная в [6], практически не прослеживается. Тем не менее наличие полосы поглощения при энергии фотонов 1—2 эВ указывает на то, что электронный спектр иттербия вблизи уровня Ферми при плавлении изменяется незначительно.

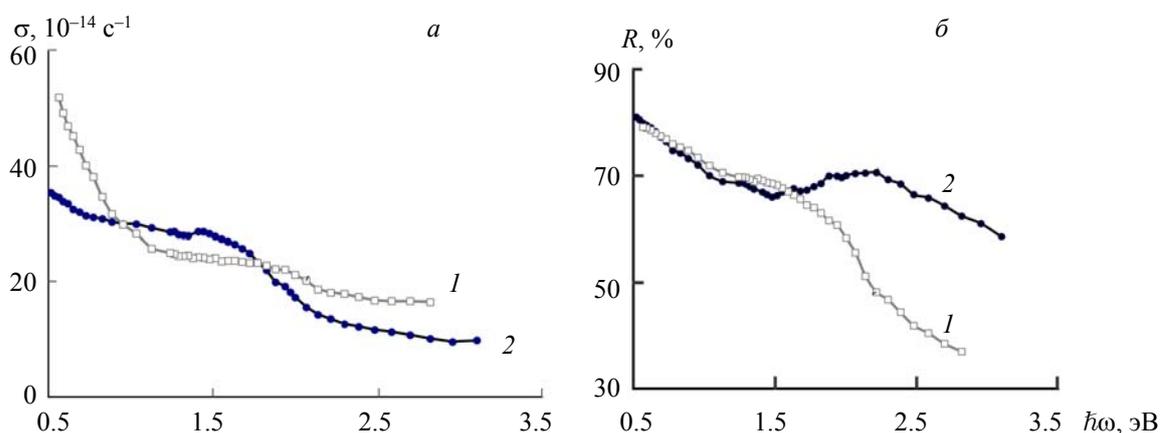


Рис. 3. Дисперсионные зависимости световой проводимости (а) и коэффициента отражения (б) для жидкого иттербия (□) и поликристаллической пленки (●); $T = 1120$ (1) и 295 К (2)

Из рис. 3, а видно, что при энергиях <0.95 эВ световая проводимость жидкого Yb представляет собой обычную друде-зинеровскую зависимость, вызванную внутриволосными переходами электронов проводимости. Для твердого состояния значения σ ниже вследствие наличия кристаллической решетки, что также объясняется в рамках этой теории. Эта закономерность проявляется и на других дисперсионных зависимостях оптических свойств жидкого иттербия (рис. 4). На рис. 4, а представлены дисперсионные зависимости действительной

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (9)$$

и мнимой

$$\varepsilon_2 = 2nk \quad (10)$$

частей диэлектрической функции от энергии фотонов, на рис. 4, б — функции характеристических потерь энергии электронов:

$$\text{Im}(\varepsilon^{-1}) = \varepsilon_2 / (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2). \quad (11)$$

Установлено, что при возрастании энергии фотонов функция характеристических потерь энергии электронов $\text{Im}(\varepsilon^{-1})$ как жидкого, так и твердого Yb увеличивается (рис. 4, б). Спектры ε_1 и ε_2 имеют довольно монотонный характер (рис. 4, а).

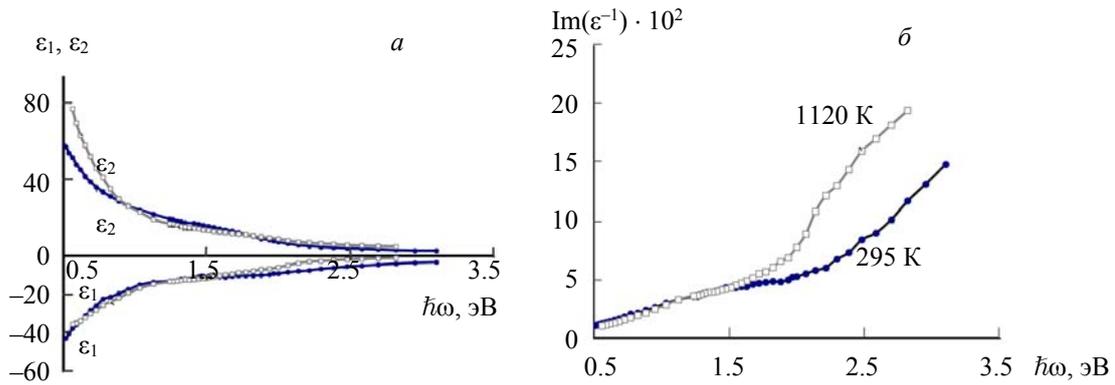


Рис. 4. Действительная (ϵ_1) и мнимая (ϵ_2) части диэлектрической проницаемости (а) и функции характеристических потерь $\text{Im}(\epsilon^{-1})$ (б) для жидкого иттербия (□) и поликристаллической пленки (●)

С учетом результатов измерений в ИК области спектра по однополосной модели проводимости почти свободных электронов в [14] нами рассчитаны концентрация электронов проводимости N_e , плазменная частота ω_p , частота релаксации γ , предельная световая проводимость $\sigma(0)$, эффективная концентрация носителей заряда l , приходящаяся на один атом жидкого иттербия. Для этого использованы соотношения для ИК области спектра [17]:

$$N_e = (0.1115/\lambda^2) \cdot 10^{22}(1 + k^2 - n^2) \left[1 + \frac{4n^2k^2}{(1 + k^2 - n^2)^2} \right], \quad (12)$$

$$\gamma = (3.77 \cdot 10^{15})/\lambda \frac{nk}{1 + k^2 - n^2}; \quad (13)$$

$$\sigma(0) = N_e e^2 / m \gamma; \quad (14)$$

$$\omega_p^2 = (4\pi N_e e^2) / m, \quad (15)$$

$$l = N_e A / d N_A, \quad (16)$$

где m — масса электрона; e — заряд электрона; N_e — концентрация электронов проводимости; A — атомная масса; d — плотность жидкого иттербия; $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$ — число Авогадро. Плотность жидкого иттербия $d = 6.72$ г/см 3 взята из [18]. В предположении, что в ИК области ($\lambda = 2.2$ мкм) вклад в световую проводимость от межполосных переходов мал по сравнению с вкладом внутриволнового ускорения электронов, при этой длине волны рассчитаны указанные характеристики по уравнениям (12)—(16). Получены концентрация электронов проводимости в жидком иттербии $N_e = 4.51 \cdot 10^{22}$ см $^{-3}$, частота релаксации $\gamma = 1.8 \cdot 10^{15}$ с $^{-1}$, $l = 1.93$ эл/ат., что хорошо согласуется с числом валентных электронов ($Z=2$). Предельная проводимость $\sigma(0) = 7.17 \cdot 10^5$ Ом $^{-1} \cdot$ м $^{-1}$ меньше удельной статической проводимости $\sigma_{st} = 9.26 \cdot 10^5$ Ом $^{-1} \cdot$ м $^{-1}$ [2], плазменная частота $\omega_p = 12.05 \cdot 10^{15}$ с $^{-1}$, энергия плазмонов $\hbar\omega = 7.93$ эВ находится в УФ области при $\lambda = 0.16$ мкм. На электронном спектрометре экспериментально установлена энергия объемных плазмонов для тонких пленок иттербия $\hbar\omega_{pv}^{exp} = 9.57$ эВ [6].

К электронам проводимости непереходных металлов, возбуждаемым электромагнитным излучением ИК диапазона, применима однополосная модель проводимости почти свободных электронов. Для описания оптических свойств переходных металлов в [1, 18] М. М. Носковым предложена двухполосная модель проводимости, согласно которой проводимость переходных металлов обусловлена вкладом медленно релаксирующих (s -подобных) и быстро релаксирующих (d -подобных) электронов, отличающихся плазменными $\omega_{ps}^2 = 4\pi N_s e^2 / m$, $\omega_{pd}^2 = 4\pi N_d e^2 / m$ (N_s, N_d, m, e — концентрации, масса и заряд s - и d -электронов соответственно) и релаксационными частотами $\gamma_s \ll \gamma_d$. В этом случае

$$\begin{cases} \varepsilon_2 = \varepsilon_{2s} + \varepsilon_{2d} = \frac{\omega_{ps}^2 \gamma_s}{(\omega^2 + \gamma_s^2)\omega} + \frac{\omega_{pd}^2 \gamma_d}{(\omega^2 + \gamma_d^2)\omega} \\ -\varepsilon_1 = -\varepsilon_{1s} - \varepsilon_{1d} = \frac{\omega_{ps}^2}{\omega^2 + \gamma_s^2} + \frac{\omega_{pd}^2}{\omega^2 + \gamma_d^2} - P, \end{cases} \quad (17)$$

где P — слабо зависящий от частоты вклад $P(\omega)$ в ε_1 со стороны локализованных электронов и от виртуальных межполосных переходов, пороговые частоты которых находятся вдалеке от рассматриваемого ИК диапазона: $P(\omega) \approx \text{const}$. Скин-эффект предполагается нормальным. Кратко опишем схему расчета электронных характеристик по двухполосной модели [1, 19].

Введем обозначение

$$\varepsilon_1^* = \varepsilon_1 - P \quad (18)$$

и примем во внимание

$$\varepsilon_{2s} = -\varepsilon_{1s} \gamma_s / \omega; \quad \varepsilon_{2d} = -\varepsilon_{1d} \gamma_d / \omega. \quad (19)$$

Тогда система уравнений (17) преобразуется:

$$\varepsilon_2 + \varepsilon_1^* \gamma_s / \omega = \omega_{pd}^2 / \omega \left(\frac{\gamma_d - \gamma_s}{\omega^2 + \gamma_d^2} \right), \quad (20)$$

$$\varepsilon_2 + \varepsilon_1^* \gamma_d / \omega = \omega_{ps}^2 / \omega \left(\frac{\gamma_s - \gamma_d}{\omega^2 + \gamma_s^2} \right). \quad (21)$$

Для определения γ_s , γ_d , ω_{ps}^2 , ω_{pd}^2 количество уравнений необходимо удвоить, написав их для двух частот поля ω_1 и ω_2 , выбранных на краях рассматриваемого интервала оптического спектра. Простые операции приводят к системе уравнений:

$$\begin{cases} ax + cy - b = 0 \\ a(x^2 - 2y) + cxy + bx + 2d = 0, \end{cases} \quad (22)$$

где $x = \gamma_s + \gamma_d$, $y = \gamma_s \gamma_d$, $a = \omega_1 \varepsilon_{21} - \omega_2 \varepsilon_{22}$, $b = \omega_1^2 \varepsilon_{11}^* - \omega_2^2 \varepsilon_{12}^*$, $c = \varepsilon_{11}^* - \varepsilon_{12}^*$, $d = \omega_1^3 \varepsilon_{21} - \omega_2^3 \varepsilon_{22}$, вторые индексы соответствуют частотам ω_1 и ω_2 . Отсюда получаем

$$x = (ab - cd)(a^2 + bc)^{-1}, \quad y = (b^2 + ad)(a^2 + bc)^{-1}; \quad (23)$$

$$\gamma_s = 0.5x - (0.25x^2 - y)^{1/2}, \quad \gamma_d = 0.5x + (0.25x^2 - y)^{1/2}; \quad (24)$$

$$\omega_{ps}^2 = \frac{\omega_1^2 + \gamma_s^2}{\gamma_s - \gamma_d} (\omega_1 \varepsilon_{21} + \gamma_d \varepsilon_{11}^*), \quad \omega_{pd}^2 = \frac{\omega_1^2 + \gamma_d^2}{\gamma_d - \gamma_s} (\omega_1 \varepsilon_{21} + \gamma_s \varepsilon_{11}^*). \quad (25)$$

Необходимое условие положительности полученных решений: $x > 0$, $y > 0$. После вычисления искомых параметров можно определить вклады s - и d -электронов в предельную световую проводимость:

$$\sigma_{0s} = \omega_{ps}^2 / 4\pi\gamma_s; \quad \sigma_{0d} = \omega_{pd}^2 / 4\pi\gamma_d; \quad \sigma_0 = \sigma_{0s} + \sigma_{0d}. \quad (26)$$

Таким образом определяются все электронные характеристики: γ_s , γ_d , ω_{ps}^2 , ω_{pd}^2 , N_s , N_d , P , σ_{0s} , σ_{0d} , $\sigma_0 = \sigma_{0s} + \sigma_{0d}$ (предельная световая проводимость). С использованием двухполосной модели проводимости по приведенной выше схеме расчета на основе экспериментальных измерений в ИК области определены электронные характеристики жидкого иттербия и его поликристаллической пленки (табл. 2 и 3). Видно, что $\gamma_s \ll \gamma_d$, $\omega_{ps}^2 \ll \omega_{pd}^2$ и, соответственно, $N_s \ll N_d$.

При плавлении концентрация носителей заряда незначительно увеличивается, а предельная световая проводимость уменьшается более чем в четыре раза, как и статическая проводимость. Как видно из табл. 3, основной вклад в предельную световую проводимость σ_0 твердого иттербия вносят s -электроны, в жидком иттербии — d -электроны. Характеристики электронов проводимости жидкого иттербия рассчитаны по однополосной модели проводимости [14]. Отметим, что для жидкого иттербия расчеты характеристик электронов проводимости по указанным моделям дают близкие результаты по их концентрации N_e , эффективной концентрации l , предельной световой проводимости $\sigma(0)$.

Т а б л и ц а 2. Характеристики электронов проводимости поликристаллического и жидкого иттербия

Металл	$\gamma_s, 10^{-15} \text{ с}^{-1}$	$\gamma_d, 10^{-15} \text{ с}^{-1}$	$\omega_{ps}^2, 10^{-30} \text{ с}^{-2}$	$\omega_{pd}^2, 10^{-30} \text{ с}^{-2}$	P	$N_s, 10^{-22} \text{ см}^{-3}$	$N_d, 10^{-22} \text{ см}^{-3}$	$(N_s+N_d), 10^{-22} \text{ см}^{-3}$
Yb _{ТВ}	0.034	1.82	12.05	95.10	3	0.37	2.99	3.36
Yb _ж	0.35	1.87	7.06	141.36	6	0.22	4.44	4.66

Т а б л и ц а 3. Проводимости твердого и жидкого иттербия

Металл	$l, \text{ эл./ат.}$	$\sigma_{0s}, 10^{-5} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$	$\sigma_{0d}, 10^{-5} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$	$\sigma_0, 10^{-5} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$	$\sigma_{st}, 10^{-5} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$	$N_e, 10^{-22} \text{ см}^{-3}$
Yb _{ТВ}	1.4	31.03	4.6	35.63	40	3.36
Yb _{ТВ}	1.99	1.7	6.67	8.37	9.26	4.66
Yb _ж (расчет по однополосной модели [13])	1.93	—	—	7.17	9.26	4.51

П р и м е ч а н и е: l — концентрация электронов проводимости, приходящаяся на атом $l = (N_s + N_d)A/dN_A$; σ_0 — предельная световая проводимость для твердого и жидкого иттербия, $\sigma_0 = \sigma_{0s} + \sigma_{0d}$; σ_{st} — статическая проводимость [2, 20].

В случае переходных металлов и их сплавов световая проводимость $\sigma(\omega)$ и действительная часть диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(\omega)$ определяются вкладами межзонных σ_b и внутризонных переходов, обусловленных s - и d -электронами проводимости $\sigma_s(\omega)$ и $\sigma_d(\omega)$:

$$\sigma(\omega) = \sigma_b + \sigma_s(\omega) + \sigma_d(\omega). \quad (27)$$

Вклады в световую проводимость $\sigma_s(\omega)$ и $\sigma_d(\omega)$ рассчитываются из формул Друде—Зинера [1]:

$$\sigma_s(\omega) = \frac{\omega_{ps}^2 \gamma_s}{(\omega^2 + \gamma_s^2) 4\pi} \quad (28)$$

$$\sigma_d(\omega) = \frac{\omega_{pd}^2 \gamma_d}{(\omega^2 + \gamma_d^2) 4\pi}. \quad (29)$$

На основании характеристик электронов проводимости поликристаллического и жидкого иттербия $\gamma_s, \gamma_d, \omega_{ps}^2, \omega_{pd}^2$ (табл. 2) по уравнениям (28) и (29) рассчитаны вклады $\sigma_s(\omega)$ и $\sigma_d(\omega)$ в световую проводимость $\sigma(\omega)$ в используемом спектральном диапазоне. Как видно из рис. 5, при энергии $\hbar\omega < 0.59 \text{ эВ}$ ($\lambda > 2.1 \text{ мкм}$) световая проводимость $\sigma(\omega)$ определяется внутризонными переходами, при этом основной вклад в $\sigma(\omega)$ вносят d -электроны.

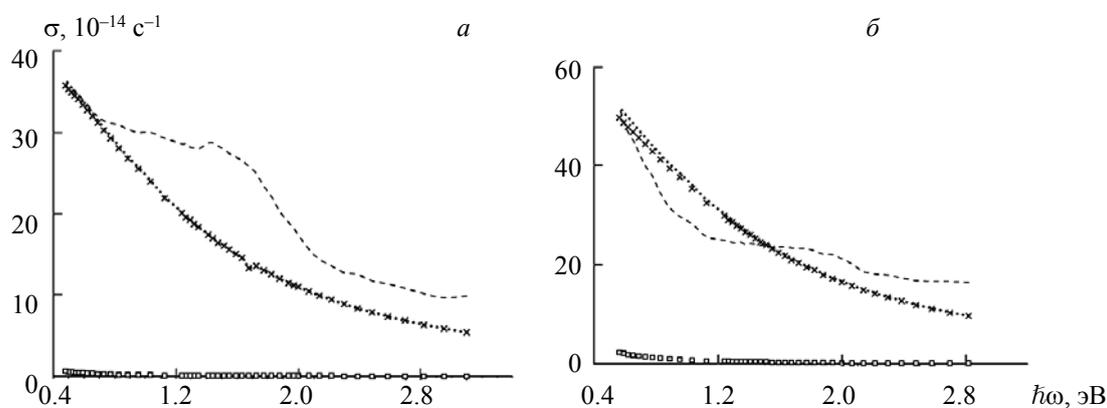


Рис. 5. Экспериментальная зависимость (штриховая линия) световой проводимости $\sigma(\hbar\omega)$ твердого (а) и жидкого Yb (б) и вклады s - (□) и d -электронов (×) проводимости, пунктир — общий вклад в световую проводимость

Заключение. Эллипсометрическим методом исследованы оптические свойства иттербия в жидком и твердом поликристаллическом состояниях в области спектра 0.4—2.6 мкм. На спектральных зависимостях световой проводимости жидкого и твердого иттербия присутствует одна широкая полоса поглощения в области энергий фотонов 1—2 эВ, связанная с переходами в системе $5d$ — $6s$ -полос. На основании результатов измерений в ИК области спектра по двухполосной модели проводимости определены плазменные и релаксационные частоты электронов проводимости и их концентрации в иттербии. Обнаружено незначительное увеличение концентрации носителей заряда при плавлении иттербия.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием АААА-А19-119031890028-0 (структурное подразделение № 2).

- [1] **М. М. Носков.** Оптические и магнетооптические свойства металлов, Свердловск, УНЦ АН СССР (1983)
- [2] **Г.-Й. Гюнтеродт, Э. Хаузер, Х. У. Кюнц.** Материалы Третьей международной конференции по жидким металлам, Москва, Металлургия (1980) 176—239
- [3] **S. D. Gilev.** *Combust. Explos. Shock Waves*, **50**, N 2 (2014) 227—234
- [4] **Y. C. Zhao, F. Porsch, W. B. Holzapfel.** *Phys. Rev. B*, **49**, N 3 (1994) 815—817
- [5] **W. E. Muller.** *Phys. Lett.*, **17**, N 82 (1965) 82—83
- [6] **J. G. Endriz, W. E. Spicer.** *Phys. Rev. B*, **2**, N 6 (1970) 1466—1492
- [7] **G. Johansen, A. R. Mackintosh.** *Solid State Commun.*, **8**, N 2 (1970) 121—124
- [8] **J. I. Larruquert, J. A. Aznarez, J. A. Mendez, J. Calvo-Angos.** *Appl. Opt.*, **45**, N 22 (2003) 4566—4571
- [9] **P. Tecmer, K. Boguslawski, M. Borkowski, P. S. Żuchowski, D. Kędziera.** *Int. J. Quantum Chem.*, **119**, N 18 (2019) 1510
- [10] **Y. Wenbin, L. Zhiyi, H. Hong, C. Nanpu, L. Xuelian.** *Mater. Sci. Eng. A*, **478** (2008) 101—107
- [11] **В. А. Оковитый, Ф. И. Пантелеенко, О. Г. Девойно, В. В. Оковитый, С. Б. Соболевский, А. И. Шевцов.** *Вестн. БНТУ*, № 6 (2011) 5—8
- [12] **I. Yadroitsev, A. Gusarov, I. Yadroitseva, I. Smurov.** *J. Mater. Proc. Technol.*, **210**, N 12 (2010) 1624—1631
- [13] **R. M. A. Azzam, N. M. Bashara.** *Ellipsometry and Polarized Light*, Amsterdam, North-Holland publ. comp. (1977)
- [14] **L. A. Akashev, V. I. Kononenko.** *High Temper.*, **37**, N 3 (1999) 491—493
- [15] **В. В. Климов.** *Наноплазмоника*, Москва, Физматлит (2009)
- [16] **А. С. Мардежов, К. К. Свиташев, В. А. Швец.** *Укр. физ. журн.*, **31**, № 1 (1986) 48—50
- [17] **Г. П. Мотулевич.** *Тр. ФИАН СССР*, **55** (1971) 3—150
- [18] **С. В. Станкус, А. С. Басин.** *Теплофизика высоких температур*, **21**, № 6 (1983) 1122—1126
- [19] **М. М. Носков.** Оптические свойства некоторых переходных металлов и двухполосная модель проводимости, препринт Ин-та физики металлов УНЦ АН СССР, Свердловск (1969)
- [20] **А. И. Волков, И. М. Жарский.** *Большой химический справочник*, Минск, Современная школа (2005)