

## СЛОЖНАЯ СТРУКТУРА ПОЛОС ПЕРЕХОДОВ КАРБИДА КРЕМНИЯ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИИ 4—35 эВ

В. В. Соболев<sup>1\*</sup>, В. Вал. Соболев<sup>1,2</sup>, Д. В. Анисимов<sup>1</sup>

УДК 537.226

<sup>1</sup> Удмуртский государственный университет,

426034, Ижевск, ул. Университетская, 1, Россия; e-mail: sobolev@uni.udm.ru

<sup>2</sup> Ижевский государственный технический университет им. М. Т. Калашикова, Ижевск, Россия

(Поступила 9 ноября 2016)

Определен обширный спектральный комплекс оптических функций полупроводника 6H-SiC в области 0—35 эВ. Спектры  $\varepsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  разложены на 15 простых полос с установлением их основных параметров, в том числе энергии максимума и силы осциллятора. Расчеты выполнены на основе экспериментального спектра отражения с использованием соотношения Крамерса—Кронига и усовершенствованного беспараметрического метода диаграмм Арганда.

**Ключевые слова:** диэлектрическая проницаемость, характеристические потери энергии электронов, максимум, сила осциллятора.

The full spectral complex of optical functions of the 6H-SiC polytype was determined in the energy range from 0 to 35 eV. The spectra of  $\varepsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  were decomposed into 15 simple bands. Main parameters of the bands were established including the maximum energy and oscillator strengths. The calculations were performed on the basis of the experimental reflectivity spectrum using the Kramers—Kronig relation and an improved nonparameteric method of the Argand diagrams.

**Keywords:** dielectric permeability, characteristic electron energy loss, maximum, oscillator strength.

Энергетические зоны и спектр  $\varepsilon_2(E)$  кристалла 6H-SiC рассчитаны различными методами, в том числе с учетом экситонов [1—3]. При этом спектр  $\varepsilon_2(E)$  представлен только как интегральная кривая всех переходов в области 4—10 эВ. Спектр отражения  $R(E)$  в широкой области энергии 0.5—35 эВ получен с помощью синхротронного излучения [4]. Общепринято, что наиболее полную информацию об электронной структуре содержит комплекс из 16 оптических функций [5]: мнимой  $\varepsilon_2(E)$  и реальной  $\varepsilon_1(E)$  частей диэлектрической проницаемости, коэффициента поглощения  $\alpha(E)$ , объемных  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  и поверхностных  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  потерь энергии электронов, эффективного количества валентных электронов  $n_{\text{eff}}$ , участвующих в переходах и др.

В настоящей работе получена новая информация об оптических свойствах и электронной структуре 6H-SiC в области 0—35 эВ.

При известном спектре  $R(E)$  все остальные оптические функции определяются с использованием компьютерных программ. Разложение спектров  $\varepsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  на компоненты и расчеты энергии максимумов  $E_i$  и полуширин полос  $H_i$ , площади  $S_i$  и амплитуды  $I_i$  полос выполняются беспараметрическим методом объединенных диаграмм Арганда. Силы осцилляторов рассчитываются по классической формуле для функции  $n_{\text{eff}}(E)$  с использованием выделенных контуров полос. Примененные методы расчетов подробно рассмотрены в [5, 6] и обсуждены в [7].

---

## THE STRUCTURE OF BANDS DUE TO SILICON CARBIDE TRANSITIONS IN THE ENERGY REGION OF 4–35 eV

V. V. Sobolev<sup>1\*</sup>, V. Val. Sobolev<sup>1,2</sup>, D. V. Anisimov<sup>1</sup> (<sup>1</sup> Udmurt State University, 1 Universitetskaya Str., Izhevsk, 426034, Russia; e-mail: sobolev@uni.udm.ru; <sup>2</sup> M. T. Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Izhevsk, Russia)

На основе спектра  $R(E)$  [4] рассчитаны спектры остальных функций (рис. 1). Экспериментальная кривая  $R(E)$  содержит слабый пик при 5.16 эВ, самый интенсивный и широкий максимум при 7.92 эВ, максимумы при ~10.15, 12.04, 15.95, 25.2 эВ и ступеньку при 17.7 эВ. Их аналоги рассчитанных других оптических функций слабо смещены по энергии. Кроме  $R(E)$  наиболее структурны функции  $\alpha(E)$  и  $E^2\varepsilon_2(E)$ . В спектрах потерь энергии электронов проявляются максимумы объемных ( $E_{pv} \cong 24.1$  эВ) и поверхностных ( $E_{ps} \cong 19.2$  эВ) плазмонов. Согласно спектрам  $n_{\text{eff}}$ , рассчитанным на основе  $\varepsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  и  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ , валентные электроны формируют спектры продольных функций  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  и  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  в области 5—20 эВ на несколько порядков менее эффективно, чем спектр поперечной функции  $\varepsilon_2(E)$ .

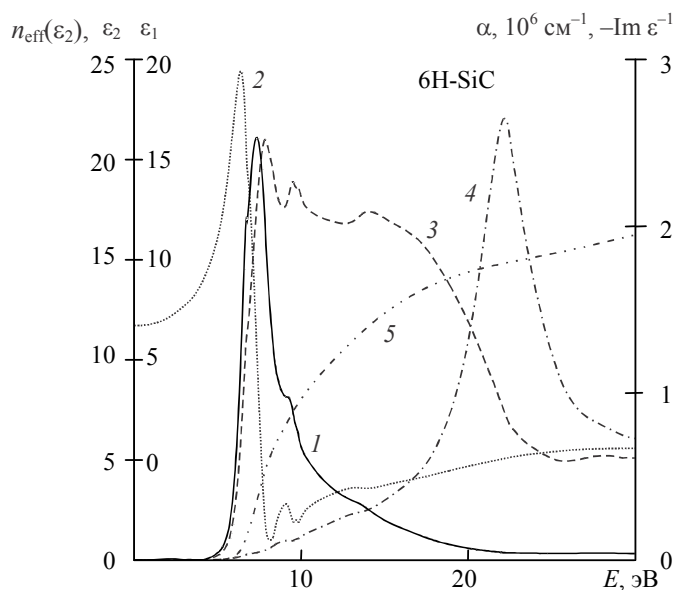


Рис. 1. Спектры  $\varepsilon_2$  (1),  $\varepsilon_1$  (2),  $\alpha$  (3),  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  (4),  $n_{\text{eff}}(\varepsilon_2)$  (5) кристалла 6H-SiC

Полученные спектры  $\varepsilon_2(E)$  и  $\varepsilon_1(E)$  политипа 6H-SiC разложены беспараметрическим методом объединенных диаграмм Арганда на 13 отдельных полос  $\varepsilon_2(E)$  (табл. 1). Самой интенсивной оказалась полоса № 2. Менее интенсивны (в ~2.5—5 раз) полосы № 3, 6—8. Их продольные аналоги в спектрах объемных характеристических потерь энергии электронов установлены при тех же энергиях или смещены в область больших энергий на ~0.2—0.6 эВ. При этом не наблюдались аналоги № 5, 10, 12, но обнаружены дополнительные две полосы № 14, 15. Интенсивность полосы объемного плазмона № 16 в ~20—50 раз больше, чем полос № 1—4 в области энергии 5—11 эВ. Сила осцилляторов полос спектра поверхностных потерь энергии электронов  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  в ~2 раза меньше, чем для объемных аналогов.

Т а б л и ц а 1. Энергии (эВ) максимумов  $E_i$ , полуширины  $H_i$ , силы осцилляторов  $F_i$  6H-SiC

№	$E_i$		$H_i$		$F_i$	
	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$
1	(5.3)	5.35	0.15	0.43	0.001	0.0005
2	7.3	7.3	1.9	1.3	3.1	0.005
3	9.2	9.2	2.2	1.9	1.2	0.002
4	10.3	11.5	1.0	2.0	0.40	0.004
5	11.8	—	1.3	—	0.61	—
6	13.5	13.6	1.8	2.2	0.75	0.008
7	15.0	15.6	1.5	2.1	0.75	0.06
8	16.7	17.3	1.6	2.5	0.60	0.15
9	18.2	19.5	1.2	2.5	0.35	0.20

Продолжение табл. 1

№	$E_i$		$H_i$		$F_i$	
	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$
10	19.6	—	1.3	—	0.36	—
11	21.2	21.4	1.2	1.8	0.34	0.15
12	22.9	—	1.4	—	0.34	—
13	24.7	26.5	1.5	2.8	0.37	0.50
14	—	29.2	—	3.5	—	0.70
15	—	31.8	—	2.6	—	0.56
$E_{pv}$	—	23.8	—	4.4	—	0.93

Установленные полосы спектров  $\varepsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  и  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  обусловлены прямыми междузонными переходами и экситонами. Во всех теоретических расчетах с учетом экситонов спектр  $\varepsilon_2(E)$  кристалла 6H-SiC приведен в виде интегральных кривых [1—3], на которых не отмечены вклады полос переходов обоих возможных типов. Это не позволяет предложить теоретическую модель детальной природы выделенных полос переходов.

Таким образом, определен спектральный комплекс кристалла 6H-SiC в области 0—35 эВ. Интегральные спектры диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_2(E)$  и характеристических потерь энергии электронов  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  и  $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$  разложены на элементарные полосы беспараметрическим методом диаграмм Арганда, причем для каждой полосы определена сила осциллятора. Полученная количественная информация о сложной тонкой структуре полос переходов политипа 6H-SiC в широкой области энергии позволит количественно и детально рассматривать теоретические расчеты зон и экситонов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (программы № 11-02-07038 и № 12-02-0707).

[1] V. Vlcek, G. Steinle-Neumann, L. Leppert, R. Armiento, S. Kummel. Phys. Rev. B, **91**, N 3 (2015) 035107(9)

[2] P. E. Trevisanutto, A. Terentjevs, L. A. Constantin, V. Olevano, F. D. Sala. Phys. Rev. B, **87**, N 20 (2013) 205143(5)

[3] В. В. Соболев. Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Том I. Введение в теорию, Москва—Ижевск, ИКИ (2012)

[4] I. Santos, P. K. Gogoi, H. B. Su, H. Huang. Phys. Rev. B, **84**, N 8 (2011) 081403(4)

[5] В. В. Соболев. Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Том II. Моделирование интегральных спектров элементарными полосами, Москва—Ижевск, ИКИ (2012)

[6] A. I. Kalugin, V. V. Sobolev. Phys. Rev. B, **71**, N 11 (2005) 115112(7)

[7] В. В. Соболев, В. Вал. Соболев, Д. В. Анисимов. ФТТ, **50**, N 1 (2016) 30—34