

УДК 539.2 : 538.915
 © 1990

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА MgS

*В. С. Степанюк, А. А. Григоренко, А. А. Кацнельсон, А. Сас,
 О. В. Фарберович, В. В. Михайлин*

Самосогласованным линейным методом присоединенных плоских волн впервые был выполнен расчет электронной зонной структуры MgS. Проведен анализ зонной структуры этого соединения в сравнении с другими сульфидами щелочноземельных металлов. Теоретически получена зависимость мнимой части функции диэлектрической проницаемости от частоты.

Сульфиды щелочноземельных металлов (ЩЗМ) являются удобными объектами для экспериментального изучения особенностей электронной структуры кристаллов данного класса и механизмов формирования квантового выхода вторичных процессов в диэлектриках благодаря относи-

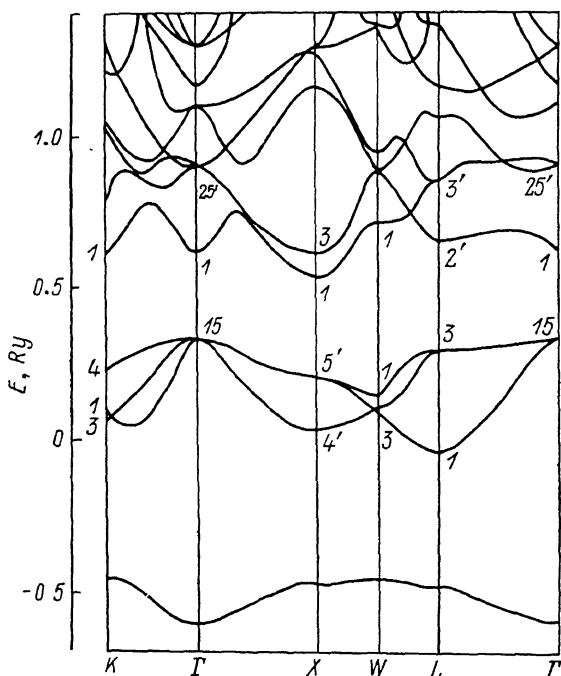


Рис. 1. Электронная зонная структура MgS.

тельно небольшой ширине запрещенной зоны в сочетании с непрямыми переходами на краю фундаментального поглощения и близости порога возбуждения верхних основных уровней катионов. Кристаллофосфоры на основе сульфидов ЩЗМ имеют целый ряд свойств, важных для практического применения. При высокоэнергетическом возбуждении они обладают ярким свечением, большой аккумулярующей способностью, что обуслов-

дивает применение сульфидов ЩЗМ в качестве высокоэффективных фото-, рентгено- и катодолюминофоров [1, 2].

Электронная структура сульфидов ЩЗМ активно исследовалась [3-8]. Были получены зонные структуры и оптические спектры CaS, SrS, BaS, однако информация о MgS практически отсутствует, за исключением, быть может, работы [9]. В этой работе в рамках функционала электронной плотности (ФЭП) проводилось изучение изменений вкладов обменно-кор-

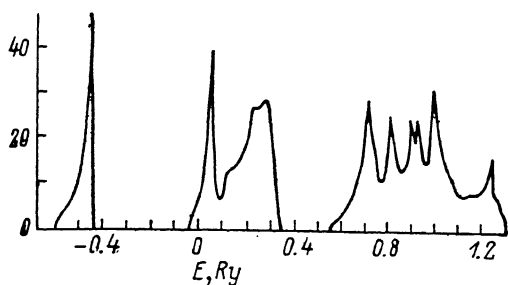


Рис. 2. Полная плотность состояний.

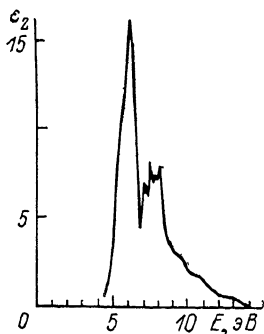


Рис. 3. Мнимая часть функции диэлектрической проницаемости MgS.

реляционной и кулоновской энергии в полную энергию MgS от параметра решетки.

Таким образом, исследование электронной структуры MgS и его оптических свойств является, безусловно, необходимым для полного описания свойств сульфидов ЩЗМ.

В ряду сульфидов группы $A^{IV}B^{VI}$, имеющих кристаллическую структуру типа NaCl, MgS является наиболее легким материалом.

Электронная структура сульфида магния была получена линейным методом присоединенных плоских волн [10] в рамках ФЭП [11]. Обменно-корреляционный потенциал был получен в приближении локальной плотности.

Зонная структура, полученная в наших расчетах, показана на рис. 1. Потолок верхней валентной зоны находится в точке Γ_{15} , дно зоны расположено в L_1 . Эта зона образована p -состояниями серы. Нижняя валентная зона образована s -состояниями серы. Дно зоны проводимости расположено в X_1 (s -состояние Mg). Это является интересным фактом, так как во всех сульфидах ЩЗМ точка X_3 (образованная d -состояниями катиона) расположена энергетически ниже, чем X_1 . Причина этого заключается в том, что возбужденные d -состояния Mg расположены гораздо выше d -состояний остальных ЩЗМ и поэтому точка X_3 образована в основном d -состояниями S, которые находятся несколько ниже, но еще не достаточно, чтобы полностью сформировать дно зоны проводимости. Оба отмеченных фактора и приводят к отличию зонной структуры MgS от всех других сульфидов ЩЗМ.

В таблице приведены значения основных энергетических зазоров. Сравнение данных этой таблицы с аналогичными данными по оксидам [12-14] и сульфидам [5] позволяет установить, что у MgS максимальная ширина валентной зоны и максимальная ширина запрещенной зоны в точках X.

На рис. 2 представлена плотность состояний MgS. Характерным для полученной картины является достаточно богатая структура зоны про-

Значения основных энергетических зазоров зонной структуры MgS

Характеристика	E, эВ
$\Gamma_{15}-\Gamma_1$	3.94
$\Gamma_{15}-X_1$	2.69
X_5-X_1	4.33
$\Gamma_{15}-L_1$	5.08
$\Gamma_{15}-X_5$	1.61
Γ_1-X_1	1.25

проводимости, причем по амплитуде пики зоны проводимости того же порядка, что и в валентной зоне. Следует отметить также дублетный характер валентной зоны.

На рис. 3 представлена полученная нами теоретическая зависимость мнимой части функции диэлектрической проницаемости ϵ_2 от энергии. Следует отметить, что при сравнении этого спектра с экспериментальными, которые еще могут быть получены, необходимо произвести жесткий сдвиг на ΔE_g [5].

Список литературы

- [1] Левшин В. Л., Михайлин В. В., Низовцев В. В. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1966. Т. 30. С. 1552—1560.
- [2] Lehman W., Ryan F. M. // J. Electrochem. Soc. 1971. V. 118. P. 477—485.
- [3] Григоренко А. А., Степанова Е. В., Степанюк В. С., Фарберович О. В., Кацнельсон А. А., Михайлин А. В. // Вестник МГУ, сер. 3. 1989. Т. 30. № 1. С. 61—63.
- [4] Степанюк В. С., Григоренко А. А., Козлов А. В., Фарберович О. В., Михайлин В. В., Степанова Е. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 58—62.
- [5] Stepanyuk V. S., Szasz A., Farberovich O. V., Grigorenko A. A., Kozlov A. V., Mikhailin V. V. // Phys. St. Sol. (B). 1989. V. 155. P. 215—220.
- [6] Kaneko Y., Morimoto K., Koda T. // Oyo Buturi. 1981. V. 50. N 3. P. 289—294.
- [7] Kaneko Y., Morimoto K., Koda T. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. V. 50. N 4. P. 1047—1048.
- [8] Kaneko Y., Morimoto R., Koda T. // J. Phys. Soc. Jpn. 1981. V. 52. N 12. P. 4385—4386.
- [9] Boguslawski P. // Sol. St. Comm. 1986. V. 57. N 8. P. 623—626.
- [10] Koeling D. D., Arbman G. O. // J. Phys. (F). 1975. V. 5. N 11. P. 2041—2054.
- [11] Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. (B). 1964. V. 136. N 3. P. 804—871.
- [12] Степанова Е. В., Степанюк В. С., Роголева М. Н., Фарберович О. В., Григоренко А. А., Михайлин В. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2303—2306.
- [13] Stepanyuk V. S., Szász A., Grigorenko B. L., Farberovich O. V., Katsnelson A. A. // Phys. St. Sol. (B). 1989. V. 155. P. 179—184.
- [14] Степанюк В. С., Григоренко А. А., Фарберович О. В., Кацнельсон А. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 299—301.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
14 декабря 1989 г.