

## Оптические свойства и электронная структура диоксида ртути

© В.В. Соболев<sup>†</sup>, В.Вал. Соболев\*, Д.В. Анисимов

Удмуртский государственный университет,  
426034 Ижевск, Россия

\* Ижевский государственный технический университет им. Калашникова,  
426069 Ижевск, Россия

(Получена 2 июля 2013 г. Принята к печати 20 августа 2013 г.)

Определены спектры комплексов оптических функций кристалла  $\text{HgI}_2$  для поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$  в области 0–20 эВ. Спектры  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  разложены на элементарные компоненты с установлением их основных параметров. Расчеты выполнены на основе экспериментального спектра отражения при 100 К для  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$  и компьютерных программ, составленных с помощью интегральных соотношений Крамерса–Кронига, аналитических формул и метода объединенных диаграмм Арганда. Установлены основные особенности спектров оптических функций и параметров компонент полос разложений  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ .

### 1. Введение

Диоксид ртути  $\text{HgI}_2$  ниже 127°C кристаллизуется в красной тетрагональной модификации с параметрами элементарной ячейки  $a = 0.4369$ ,  $c = 1.243$  нм,  $z = 2$  (группа симметрии  $D_{4h}^{15}-P4_2/nmc$ ) [1]. Благодаря полупроводниковым свойствам и высоким атомным номером компонент он относится к самым перспективным соединениям для изготовления детекторов рентгеновских и  $\gamma$ -квантов [2,3]. Его оптические свойства и электронная структура исследованы явно недостаточно [4]. Сначала [5,6] фотографической методикой наблюдались сложные структуры поглощения в области 480–535 нм с двумя очень интенсивными узкими линиями при  $\sim 2.32$  и 2.52 эВ для 77.3 К,  $\sim 2.355$  и 2.55 эВ при 4.2 К. По измерениям фотоэлектрической методикой для длинноволновой полосы были определены параметры: сила осциллятора  $f \approx (1.2 \pm 0.4)10^{-4}$ ,  $\alpha_{\max} \approx 0.8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ ,  $R_{\max} \approx 0.14$  (77.3 К),  $f(4.2 \text{ К}) \approx f(77.3 \text{ К})$ ,  $\alpha_{\max}(4.2 \text{ К}) \approx 6 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ ,  $R_{\max}(4.2 \text{ К}) \approx 0.35$  (77.3 К)[6]. В другой работе [7] кривая поглощения поликристаллического тонкого слоя начинается с  $\sim 2.3$  эВ, возрастает до  $\sim 5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$  в максимуме самой длинноволновой полосы при  $\sim 2.35$  эВ для 20 К, почти постоянна на уровне  $\sim 3.9 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$  в области 2.36–2.48 эВ. Сплошное поглощение несовершенной поликристаллической пленки, видимо, перекрывается с узкой полосой экситонного поглощения. Согласно упрощенным оценкам без учета этого возможного перекрытия при  $n = 2.7$  и количества формульных единиц  $\text{HgI}_2$  в единице объема  $N \approx 0.838 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  сила осциллятора самой длинноволновой экситонной полосы равна  $\sim 7.6 \cdot 10^{-4}$  и  $3.22 \cdot 10^{-4}$  для контуров этой полосы типов лорентциана и гауссиана соответственно. В работе [7] не указана оптическая плотность изученных слоев, которая, возможно, была значительно больше допустимой, т.е. большей 4–5; в этом случае величина  $\alpha_{\max}$  была заметно занижена. Несовершенства образцов и методик регистрации спектров поглощения

рассмотренных работ не позволяют уверенно оценить силу осциллятора самой интенсивной экситонной полосы кристалла  $\text{HgI}_2$ . В широкой области энергии спектры отражения монокристаллов исследованы при 4.2 К для поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ ,  $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$  в области 2.25–2.65 эВ,  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$  в области 538–526 нм и 1.8–6.0 эВ [8], в области 1.9–10 эВ при 100 К и  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ , 2–6 эВ при 15 К и  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ ,  $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$  [9]. Образцы легко скальваются перпендикулярно оптической оси, а с несовершенной естественной поверхностью содержат эту ось. Поэтому измерения для  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$  выполнены на сколах, а для  $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$  — на необработанных выращенных образцах. Длинноволновая интенсивная экситонная полоса отражения резко поляризована и наблюдается только для поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ . В области больших энергий имеются две группы полос в области 2–6 и 6–10 эВ, разделенные глубоким минимумом и состоящие из большого количества сильно перекрывающихся частично поляризованных максимумов.

Теоретически зоны и спектры  $\varepsilon_2(E)$  тетрагонального  $\text{HgI}_2$  рассчитаны в [2,10,11]. Верхняя валентная полоса шириной менее 4 эВ состоит из пяти дублетных зон; ниже на  $\sim 1$ –3 эВ находится еще изолированный дублет, а еще ниже на  $\sim 6.0$ –7.5 эВ и  $\sim 12$  эВ — две сложные  $d$ -зоны ртути и  $s$ -зона йода. Нижняя зона проводимости (НЗП) дублетна и изолирована, а выше ее расположено много сильно дисперсных и перекрывающихся зон. Поэтому, естественно, теоретические спектры  $\varepsilon_2(E)$  и  $R(E)$  содержат очень большое количество пиков, конкретная природа которых в этих расчетах не определена.

Для экспериментального исследования электронной структуры кристалла и анализа теоретических расчетов необходимо выполнить большой комплекс всевозможных измерений в широкой области энергии, в том числе, помимо оптических спектров, спектры фотоэмиссии на совершенных и ориентированных монокристаллах. Такие измерения традиционно наиболее доступны только для спектра отражения, который содержит „сырую“ информацию об электронной структуре, причем энергии максимумов полос отражения могут заметно отличаться от энергий полос переходов.

<sup>†</sup> E-mail: sobolev@uni.udm.ru

**Таблица 1.** Энергии (эВ) максимумов и ступенек (в скобках) спектров оптических функций кристалла HgI<sub>2</sub>

№	<i>R</i>	$\epsilon_1$	$\epsilon_2$	<i>n</i>	<i>k</i>	$\alpha$	$\epsilon_2 E^2$	$-\text{Im}\epsilon^{-1}$	$-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$	$\sigma$
1	2.339	2.338	2.338	2.338	2.393	2.393	2.338	2.344	2.335	2.338
2	2.378	12.368	—	2.368	—	—	—	—	—	—
3	2.49	2.49	(2.5)	2.49	2.51	2.51	2.51	2.51	2.51	(2.5)
4	3.09	3.05	3.13	3.06	3.14	3.14	3.14	3.16	3.16	3.14
5	3.32	3.28	3.33	(3.3)	3.34	3.35	3.35	3.37	3.36	3.34
6	3.71	3.59	—	3.63	—	—	—	—	—	—
7	(3.8)	—	3.82	(3.8)	3.85	3.87	3.85	—	—	3.84
8	4.12	4.02	4.11	4.04	(4.1)	(4.1)	4.13	3.96	3.96	4.12
9	4.29	—	(4.2)	(4.2)	4.33	4.34	4.27	(4.2)(4.2)(4.2)	(4.2)	4.25
10	—	—	—	—	—	—	—	(4.8)	4.76	—
11	—	—	—	—	—	—	—	5.05	(5.0)	—
12	5.29	5.23	(5.3)	5.23	5.31	5.31	(5.3)	5.32	5.32	(5.3)
13	(5.4)	(5.5)	(5.5)	5.47	(5.5)	(5.5)	(5.5)	(5.5)	(5.5)	(5.5)
14	6.18	6.18	6.21	6.17	6.23	6.23	6.24	6.23	6.23	6.23
15	6.59	(6.6)	6.62	6.87	6.64	6.65	6.63	6.72	6.72	6.62
16	6.95	6.88	7.08	—	(7.2)	(7.3)	(7.2)	—	—	(7.1)
17	(8.5)	8.36	—	(8.4)	(8.2)	(8.2)	(8.2)	8.28	8.24	(8.1)
18	8.83	—	8.75	—	8.87	(8.9)	8.79	—	—	8.79
19	—	(9.0)	(9.0)	(9.0)	—	—	(9.0)	(9.0)	(9.0)	(9.0)
20	9.31	—	(9.7)	—	9.31	9.35	—	—	—	—
<i>E<sub>ps</sub></i>	—	—	—	—	—	—	—	—	12.2	—
<i>E<sub>pv</sub></i>	—	—	—	—	—	—	—	14.2	—	—

Цель настоящего сообщения состоит в получении новой информации об оптических свойствах и электронной структуре кристалла HgI<sub>2</sub> в широкой области энергии: в определении спектров полного комплекса фундаментальных оптических функций, разложении спектров  $\epsilon_2$  и  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  на элементарные компоненты с определением их основных параметров и установлении основных особенностей спектров оптических функций и их компонент.

## 2. Методики расчетов

Общепринято, что наиболее полную информацию об оптических свойствах содержат спектры 15 фундаментальных оптических функций [12,13]: спектры коэффициентов отражения (*R*) и поглощения ( $\alpha$ ); показателей преломления (*n*) и поглощения (*k*); мнимой ( $\epsilon_2$ ) и реальной ( $\epsilon_1$ ) частей диэлектрической проницаемости  $\epsilon$ ; реальных ( $\text{Re}\epsilon^{-1}$ ,  $\text{Re}(1 + \epsilon)^{-1}$ ) и мнимых ( $-\text{Im}\epsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$ ) частей обратных диэлектрических функций  $\epsilon^{-1}$  и  $(1 + \epsilon)^{-1}$ ; интегральной функции связанной плотности состояний *I<sub>d</sub>*, которая с точностью до универсального множителя равна  $E^2\epsilon_2$  при постоянстве вероятностей переходов; эффективного количества валентных электронов  $n_{\text{eff}}(E)$ , участвующих в переходах до данной энергии *E*, которые определяются четырьмя способами — по спектрам  $\epsilon_2$ , *k*,  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$ ,  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$ ; эффективной диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{\text{eff}}$  и других.

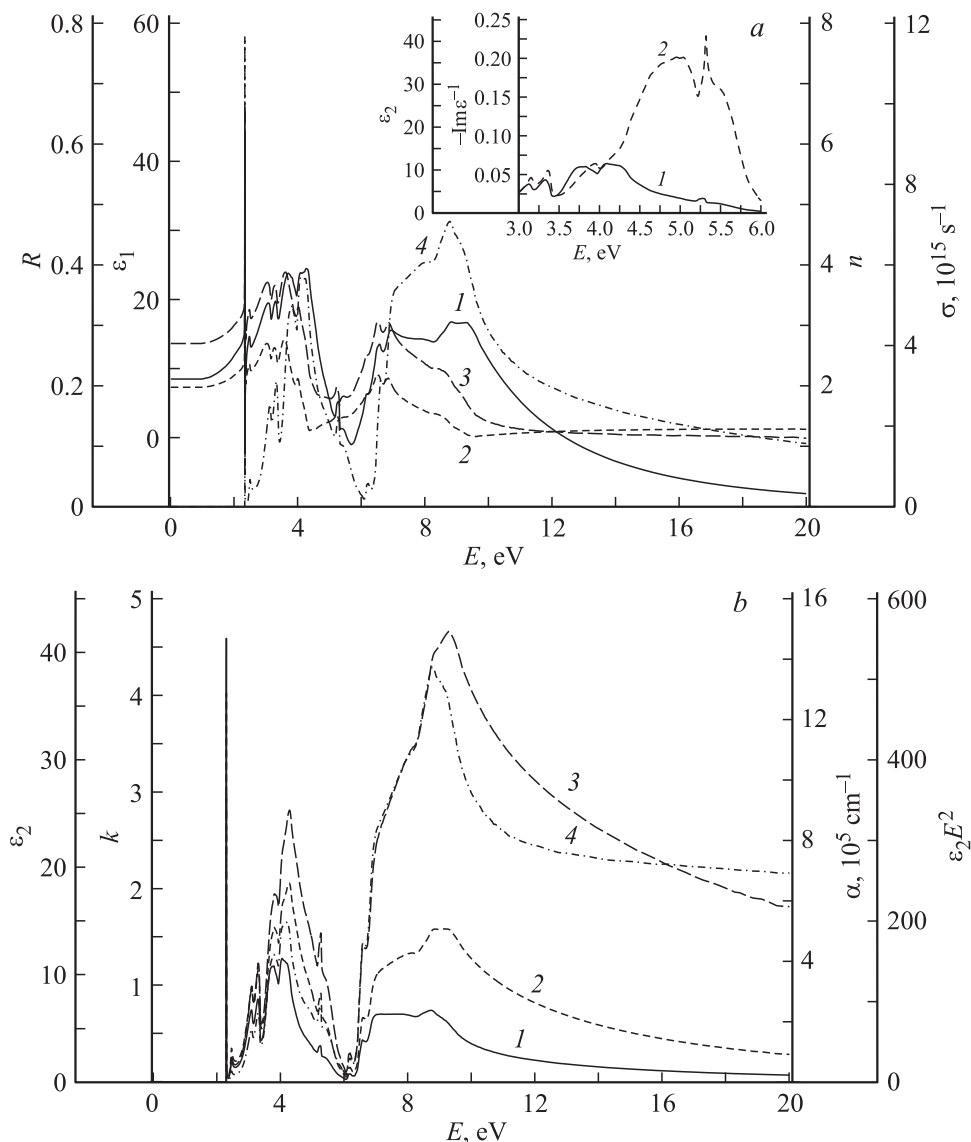
Обычно комплекс оптических функций определяют по специальным компьютерным программам на основе интегральных соотношений Крамерса–Кронига и анали-

тических формул связи между оптическими функциями, если известен спектр отражения *R(E)* в широкой области энергии. Разложение спектров  $\epsilon_2$  и  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  на компоненты и определение основных параметров компонент (энергии максимумов *E<sub>i</sub>* и полуширин *H<sub>i</sub>*, площадь полосы *S<sub>i</sub>*, ее амплитуда *I<sub>i</sub>*) выполняются методом объединенных диаграмм Арганда. Используемые методы подробно изложены [12,13,14,15] и многократно использованы [16,17].

## 3. Результаты расчетов и их обсуждение

Спектры отражения сколов HgI<sub>2</sub> измерены в области 1.8–10 эВ при 100 К [9], 1.8–6 эВ при 4.2 К [8] для **E** ⊥ **c**. Сколы образцов с поверхностью, содержащей оптическую ось, получаются весьма несовершенными, а спектры *R(E)* от несовершенной поверхности необработанных монокристаллов для **E** ⊥ **c** при 15 К сильно занижены неравномерно по энергии в области 1.8–6 эВ. Естественно спектр *R(E)* для второй поляризации также существенно, видимо, деформирован и не может быть применен для расчетов других оптических функций. Поэтому в настоящей работе использованы спектры *R(E)* при 100 К в области 1.8–10 эВ [9] и при 4.2 К в области 2.33–2.36 эВ [8].

В расчетах экстраполяция *R(E)* в области прозрачности для *E* < 1.8 эВ принималась почти постоянной, а в области *E* > 10 эВ — по методике Филиппа–Тафта [12,13] для  $R \sim E^{-P}$ . Обе экстраполяции выполнялись при условии соблюдения правила сумм для *n(E)* в



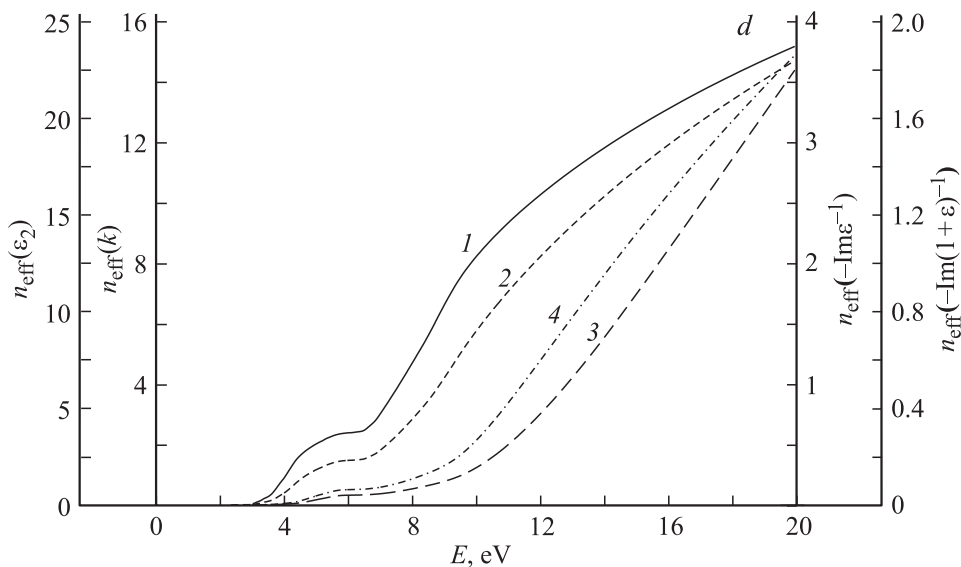
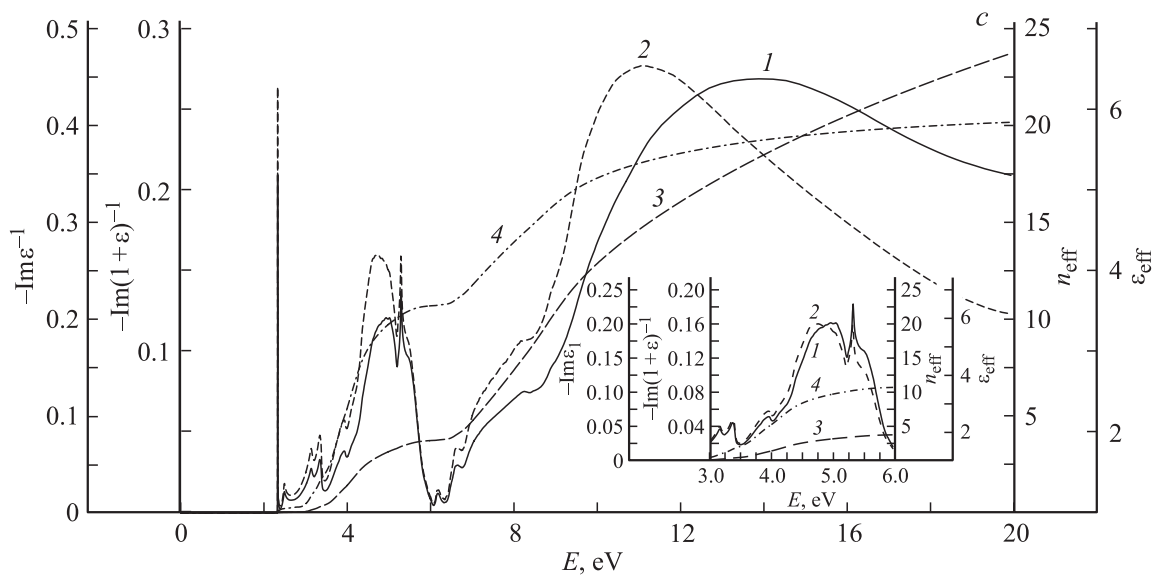
Экспериментальный спектр  $R(E)\text{HgI}_2$  при 100 К для  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$  (1), расчетные спектры  $\epsilon_1$  (2),  $n$  (3),  $\sigma$  (4) (a, a'),  $\epsilon_2$  (1),  $k$  (2),  $\alpha$  (3),  $\epsilon_2 E^2$  (4) (b, b'),  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  (1),  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$  (2),  $n_{\text{eff}}$  (3),  $\epsilon_{\text{eff}}$  (4) (c, c') и спектры  $n_{\text{eff}}$ , рассчитанные на основе  $\epsilon_2$  (1),  $k$  (2),  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  (3),  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$  (4) (d) в области 0–20 эВ (a, b, c, d) и 2.3–2.6 эВ (a, b', c'); на вкладышах спектры  $\epsilon_2$  (1),  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  (2) в области 3–6 эВ (I, a),  $R$  (1),  $\epsilon_1$  (2),  $n$  (3),  $\sigma$  (4) (I a') и  $\epsilon_2$  (1),  $k$  (2),  $\alpha$  (3),  $\epsilon_2 E^2$  (4) в области 2.32–2.37 эВ (I'),  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  (1),  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$  (2),  $n_{\text{eff}}$  (3),  $\epsilon_{\text{eff}}$  (4) в области 3–6 эВ (Ic),  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  (1),  $-\text{Im}(1 + \epsilon)^{-1}$  (2),  $n_{\text{eff}}$  (3),  $\epsilon_{\text{eff}}$  (4) в области 2.335–2.360 эВ (Ic').

области энергии  $E > 12$  эВ: кривая  $n(E)$  должна быть близкой к значению  $n \approx 1$  и с ростом энергии расти. Экспериментальный спектр отражения содержит интенсивный и узкий экситонный пик № 1, 11 максимумов и 5 ступенек (см. рисунок a, a', табл. 1). Их аналоги наблюдаются в расчетных спектрах большинства остальных оптических функций с небольшими смещениями по энергии в область меньших ( $\epsilon_1, n$ ) или больших энергий ( $\epsilon_2, k, \alpha, \epsilon_2 E^2, -\text{Im}\epsilon^{-1}$ ).

Спектральное распределение интенсивности структур (максимумов и ступенек) сильно зависит от природы оптической функции. Экситонная кривая  $R(E)$  при  $\sim 2.34$  эВ сильно асимметрична с коротковолновой ступенькой при  $\sim 2.342$  эВ. У других функций она резко

сужается, становится почти симметричной гауссова типа с коротковолновой асимметрией в спектрах  $\epsilon_2(E), k(E), \alpha(E), \epsilon_2 E^2$ , которая резко уменьшена у  $\epsilon_2(E)$ . Максимумы оптических функций смещены относительно максимума  $\epsilon_2$  на  $\sim 0.7$  ( $k, \alpha$ ),  $\sim 0.4$  мэВ ( $R$ ) в область больших энергий и на  $\sim 0.6$  мэВ ( $\epsilon_1, n$ ) в область меньших энергий; энергия продольно-поперечного расщепления  $\Delta E_{lt} = E(-\text{Im}\epsilon^{-1}) E(\epsilon_2) \approx 5$  мэВ. Все остальные структуры гораздо более широкие. Поэтому для них различия в положении максимумов существенно больше.

Спектры всех оптических функций делятся на две группы с резким минимумом при  $\sim 5$ –6 эВ. Согласно теоретическим расчетам [11] верхняя валентная полоса состоит из пяти дублетных зон, а дублетная НЗП



Продолжение рисунка

отделена от остальных зон проводимости большим промежутком. Поэтому естественно предположить, что длинноволновая группа полос обусловлена переходами из верхней валентной полосы в нижнюю дублетную зону проводимости, а коротковолновая группа полос оптических спектров — переходами в более верхние зоны проводимости. Интересно отметить, что в длинноволновой группе полученных спектров оптических функций наблюдаются пять дублетных структур. Структуры коротковолновой группы полос перекрываются существенно больше, чем в длинноволновой группе. Поэтому ее максимумы выражены хуже.

При переходе от длинноволновой группы к коротковолновой отражение и величины  $\epsilon_1(E)$ ,  $n(E)$  понижаются в  $\sim 1.3$  раза, причем  $\epsilon_1(E)$  не имеет отрицательного минимума и близка к нулю около 9.5 эВ.

С повышением энергии коэффициент поглощения возрастает до  $\sim 8 \cdot 10^5$  и  $15 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$  в обеих группах

полос. Такое поглощение до  $\sim 10^6 \text{ см}^{-1}$  характерно для сильно ионных кристаллов [3,4]. При очень сильном падении  $\epsilon_2(E)$  в области энергии  $E > 10$  эВ кривые  $\alpha(E)$  и  $\epsilon_2 E^2(E)$  сохраняют очень высокие значения.

Спектры характеристических потерь энергии электронов содержат очень широкие и интенсивные полосы с максимумом при  $E_{pv1} = 14.2$  и  $E_{ps1} = 11$  эВ, обусловленные возбуждением всего коллектива валентных электронов. В области 4.4–5.2 эВ наблюдается широкая и сравнительно интенсивная полоса потерь энергии электронов при резком падении отражения  $R(E)$  и  $\epsilon_2(E)$ , а также отсутствии их структур (рисунок, *a, c*). Естественно предположить, что эта полоса связана с возбуждением плазмонов за счет коллектива верхних валентных электронов. Проявление длинноволновой полосы плазмонов характерно для всех слоистых кристаллов [4,18]. Из расчетного спектра  $n_{\text{eff}}(E)$  (см. рисунок, *c*)

Таблица 2. Параметры разложения спектров  $\varepsilon_2$  и  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  кристалла  $\text{HgI}_2$  при  $E \perp c$ 

№	$E_i$		$H_i$		$S_i$		$I_i$		$S(\varepsilon_2)/S(-\text{Im}\varepsilon^{-1})$
	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	$\varepsilon_2$	$-\text{Im}\varepsilon^{-1}$	
1	2.339	2.34	0.0017	0.003	0.11	0.001	42.2	0.32	110
2	2.502	2.49	0.06	0.07	0.18	0.002	1.9	0.02	90
3	2.63	2.65	0.22	0.19	0.42	0.003	1.25	0.01	140
4	2.875	2.84	0.20	0.13	0.68	0.003	2.2	0.017	227
5	3.015	3.00	0.12	0.15	0.48	0.005	2.6	0.02	96
6	3.115	3.13	0.16	0.12	1.26	0.007	5.1	0.04	180
7	—	3.23	—	0.12	—	0.004	—	0.02	—
8	3.32	3.34	0.185	0.12	2.07	0.009	7.25	0.05	230
9	3.598	3.58	0.17	0.19	1.28	0.007	4.87	0.024	183
10	3.738	3.78	0.22	0.18	2.44	0.011	7.2	0.04	222
11	3.875	3.93	0.20	0.15	1.72	0.012	5.56	0.05	143
12	4.09	4.15	0.265	0.20	3.43	0.02	8.42	0.065	172
13	4.275	4.45	0.233	0.28	2.27	0.04	6.3	0.092	57
14	4.53	—	0.38	—	3.01	—	5.18	—	—
15	4.95	5.07	0.39	0.35	1.97	0.089	3.3	0.166	22
16	5.27	5.32	0.13	0.09	0.52	0.018	2.56	0.13	29
17	5.485	5.48	0.19	0.21	0.54	0.041	1.82	0.125	13
18	5.668	5.65	0.18	0.22	0.32	0.031	1.15	0.09	10
19	5.878	5.85	0.17	0.16	0.15	0.008	0.57	0.03	19
20	6.21	6.22	0.12	0.15	0.13	0.004	0.7	0.018	33
21	6.635	6.67	0.25	0.30	1.05	0.014	2.7	0.03	75
22	7.01	7.05	0.42	0.30	3.63	0.014	5.6	0.03	259
23	7.35	7.40	0.38	0.50	1.82	0.031	3.1	0.04	59
24	7.67	7.78	0.46	0.40	2.65	0.019	3.74	0.03	139
25	8.12	8.24	0.73	0.71	4.57	0.052	4.1	0.048	88
26	8.745	9.166	0.86	0.30	5.9	0.012	4.5	0.025	492
27	9.10	10.1	0.80	1.4	1.71	0.228	1.4	0.108	8
28	9.65	11.5	0.90	1.65	4.67	0.347	3.4	0.14	13
$E_{pv1}$	—	14.2	—	5.6	—	3.449	—	0.44	—
$E_{pv2}$	—	4.74	—	0.40	—	0.092	—	0.15	—
$E_{pv2'}$	—	5.07	—	0.35	—	0.089	—	0.166	—

следует, что длинноволновая плазменная полоса  $\text{HgI}_2$  обусловлена возбуждением коллектива около четырех валентных электронов на одну формульную единицу соединения. Эта же группа валентных электронов участвует в формировании длинноволновой полосы оптических функций.

Среди всех структур выделяется очень узкий пик всех оптических функций при  $\sim 5.3$  эВ. Возможно, он обусловлен переходами экситонного типа благодаря одинаковой кривизне НЗП и одной из валентных зон, расположенной ниже максимума верхней валентной зоны (ВВЗ) на  $\sim 3$  эВ, в протяженном участке зоны Бриллюэна (ЗБ). Кривая  $n_{\text{eff}}(E)$  очень резко возрастает в окрестности длинноволнового крыла экситона при  $\sim 2.34$  эВ и далее после экситонного пика сохраняет насыщение на уровне  $\sim 0.0153 \pm 0.0005$  эВ (рисунок, *c*). По определению этот параметр — сила осциллятора длинноволнового экситона в расчете на одну формульную единицу. Этот уникальный метод прямого определения силы осциллятора перехода кристалла можно применять в случае очень интенсивной узкой самой длинноволновой экситонной линии, которая не перекры-

вается со сплошным фоном или другими экситонными линиями [19,20].

С ростом энергии кривая  $n_{\text{eff}}(E)$  для  $E > 6.5$  эВ возрастает до  $\sim 23$  при 20 эВ (рисунок, *c*). На одну формульную единицу  $\text{HgI}_2$  приходится 16 валентных электронов. Согласно теоретическим расчетам  $s$ - и  $d$ -зоны ртути расположены ниже максимума ВВЗ на  $\sim 5$  и 7 эВ соответственно. Часть электронов этих зон участвует в формировании  $n_{\text{eff}}$ .

Оптические функции обусловлены разными эффектами: например,  $\varepsilon_2$  — диссипацией энергии падающей электромагнитной волны,  $k$  — затуханием ее амплитуды,  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  — энергетическими потерями быстрых заряженных частиц. Поэтому при формировании этих оптических функций участвует неодинаковое количество валентных электронов [12,13]. На рисунке, *d* представлены спектры  $n_{\text{eff}}(E)$   $\text{HgI}_2$ , рассчитанные по спектрам  $\varepsilon_2(E)$ ,  $k(E)$  и потерь электронов. Наиболее эффективно валентные электроны формируют спектр  $\varepsilon_2(E)$ , примерно в  $\sim 2$  раза слабее — спектр  $k(E)$  в области  $E < 12$  эВ и на порядок слабее — спектры объемных и поверхностных потерь энергии электронов.

Далее методом объединенных диаграмм Арганда спектры  $\epsilon_2$  и  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  кристалла  $\text{HgI}_2$  были разложены на элементарные компоненты и определены следующие их параметры: энергии максимумов  $E_i$ , полуширин  $H_i$ , амплитуды  $I_i$  и площади  $S_i$  полос (табл. 2). Всего в разложенных спектрах установлено 28 полос переходов, причем полосы № 3, 4, 6, 9, 10, 14, 15, 16, 18, 19, 23, 24 в интегральных спектрах структурно не проявляются, т.е. разложение исходных кривых  $\epsilon_2$  и  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  позволило дополнительно к 17 структурам интегральным выявить скрытые 12 полос.

Параметр  $S_i$  непосредственно характеризует интенсивность полосы. Из анализа параметра  $S_0 = S_i(\epsilon_2) : S_i(-\text{Im}\epsilon^{-1})$  отношений интенсивностей поперечной компоненты относительно интенсивности ее продольного аналога следует, что полосы переходов в основном делятся на две группы: длинноволновую (2.3–4.1 эВ) и коротковолновую (4.2–10 эВ) с  $S_0 \approx 150\text{--}200$  и  $10\text{--}30$  с изменением  $S_0$  в  $\sim 7\text{--}10$  раз. Это свидетельствует о том, что интенсивность формирования продольных компонент полос переходов относительно слабая в узкой длинноволновой области энергии с ростом энергии повышается на порядок.

#### 4. Заключение

Итак, в данном сообщении впервые определены спектры комплекса фундаментальных оптических функций кристалла  $\text{HgI}_2$  в области 0–20 эВ при поляризации  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ , а полученные интегральные спектры диэлектрической проницаемости и характеристических потерь энергий электронов разложены на элементарные поперечные и продольные компоненты полос переходов с установлением их основных параметров. Полученная обширная информация об электронной структуре  $\text{HgI}_2$  позволит количественно и детально анализировать теоретические расчеты зон и оптических спектров в широкой области энергии.

Работа выполнена при поддержке программ РФФИ № 11-02-07038, 12-02-07007.

#### Список литературы

- [1] В.А. Гайслер, В.М. Залетин, Н.В. Лях, И.Н. Ножкина, В.И. Фомин. *Диодид ртути: получение, свойства, применение* (Новосибирск, Наука, 1984).
- [2] J.H. Yee, J.M. Sherohman, G.A. Armantrot. IEEE Trans. Nucl. Sci. **23**, 117 (1976).
- [3] К.Г. Булатецкий, В.М. Залетин, В.И. Фомин. ПТЭ (1983).
- [4] В.В. Соболев. *Зоны и экситоны галогенидов металлов* (Кишинев, Штиинца, 1987).
- [5] Е.Ф. Гросс, А.А. Каплянский. ЖТФ, **25**, 2061 (1955).
- [6] M. Sieskind, J.B. Grun, S. Nikitine. J. Phys. Rad., **22**, 777 (1961).
- [7] И.С. Горбань, С.Н. Рудько. Опт. и спектр., **12**, 610 (1962).
- [8] K. Kanzaki, I. Imai. J. Phys. Soc. Jpn., **32**, 1003 (1972).
- [9] A. Anedda, E. Grilli, M. Guzzi, F. Raga, A. Serpi. Sol. St. Commun., **39**, 1121 (1981).
- [10] Y.-Ch. Chang, R.B. James. Phys. Rev. B, **46**, 15 040 (1992).
- [11] R. Ahuja, O. Eriksson, B. Johansson, S. Auluck, J.M. Wills. Phys. Rev. B, **54**, 10 419 (1996).
- [12] В.В. Соболев, В.В. Немощкаленко. *Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников* (Киев, Наук. думка, 1988).
- [13] В.В. Соболев. *Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. I. Введение в теорию* (Москва–Ижевск, изд-во Ин-та компьютерных исследований, 2012).
- [14] A.I. Kalugin, V.V. Sobolev. Phys. Rev. B, **71**, 115 112 (2005).
- [15] В.В. Соболев. *Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. II. Моделирование интегральных спектров элементарными полосами* (Москва–Ижевск, изд-во Ин-та компьютерных исследований, 2012).
- [16] В.В. Соболев, В.Вал. Соболев, С.В. Шушков. ФТП, **45**, 1297 (2011).
- [17] Д.В. Анисимов, В.В. Соболев, В.Вал. Соболев. Сб. тр. VIII междунар. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники“. (СПб., Изд-во политехн. ун-та, 2012) с. 358.
- [18] А.Н. Тимошкин, В.Вал. Соболев, В.В. Соболев. ФТТ, **42**, 37 (2000).
- [19] В.В. Соболев, В.В. Немощкаленко. *Электронная структура твердых тел в области фундаментального края поглощения. Т. I. Введение в теорию*. (Киев, Наук. думка, 1992).
- [20] В.В. Соболев, В.Вал. Соболев. *Электронная структура твердых тел в области фундаментального края поглощения. Т. II. Кристаллы группы II–VI*. (Москва–Ижевск, изд-во Ин-та компьютерных исследований, 2012).

Редактор Л.В. Полянская

#### The optical properties and electronic structure of the mercury iodide

V.V. Sobolev, V.Val. Sobolev\*, D.V. Anisimov

Udmurt State University,  
426034 Izhevsk, Russia

\* Kalashnikov Izhevsk State Technical University,  
426069 Izhevsk, Russia

**Abstract** The spectra of the mercury iodide fundamental optical functions set were obtained in the region 0 to 20 eV at 100 K for the polarization  $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ . The spectra of the dielectric permittivity and volume characteristic electron energy losses were decomposed into the elemental transverse and longitudinal components of the transition bands. Their main peculiarities and parameters were obtained. The calculations were carried out on the basis of the known reflectivity spectrum with the computer program which found by the integral Kramers–Kronig interrelations, analytical formula and method of the combined Argand diagram.