

Тонкая структура диэлектрической проницаемости алмаза

© В.В. Соболев,[¶] А.П. Тимонов, В.Вал. Соболев

Удмурдский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

(Получена 17 марта 1999 г. Принята к печати 17 февраля 2000 г.)

Получены спектры полного комплекса оптических функций трех различных образцов алмаза в области 0–32 эВ. Расчеты выполнены на основе экспериментальных спектров отражения при помощи метода Крамерса–Кронига. Дан анализ особенностей спектров оптических функций и их различий для трех образцов. На основе метода объединенных диаграмм Арганда спектры диэлектрической функции впервые разложены на элементарные компоненты. Определены их энергии и силы осцилляторов. Структура компонент сопоставлена со структурой теоретического спектра диэлектрической проницаемости и ожидаемого спектра межзонных переходов. Установлено хорошее согласие полученных данных с теорией.

Введение

Алмаз очень популярен в науке и технике благодаря ряду уникальных свойств [1–3]. Не случайно его именем названа большая группа ковалентных полупроводниковых материалов (“алмазоподобных”). Он является классическим модельным кристаллом в теории электронной структуры твердых тел. С давних лет проводятся многочисленные теоретические расчеты его энергетических уровней (зон) [3–7]. Для алмаза характерны простейшие типы межзатомных связей и структура элементарной ячейки. Несмотря на это, результаты расчета зон многих работ заметно различаются. Многие годы оставались неясными разногласия между данными теории зон и опыта для спектра мнимой части диэлектрической проницаемости ε_2 . В основном они заключаются в том, что главный максимум теоретического спектра ε_2 был по сравнению с опытным сильно смещен в область больших энергий и слишком интенсивным. Эта проблема оказалась настолько фундаментальной и важной, что в последние годы к ней вернулись сразу несколько групп теоретиков [8–12]. Они применили самые современные методы с учетом эффектов обменной корреляции, нелокальности, многочастичности и, иногда, экситонов в широкой области энергии 4–20 эВ. Им удалось заметно сблизить данные теории и опыта для положения максимума ε_2 . Однако по форме теоретические спектры ε_2 продолжают сильно отличаться от опытного спектра. При этом особенно большие расхождения теории и опыта наблюдаются для спектров ε_1 и R , которые, как правило, объясняются неучетом или неполным учетом роли метастабильных экситонов в области энергии $E > E_g$. К сожалению, в работах [8–12] совсем не рассматриваются другие фундаментальные вопросы спектра ε_2 алмаза: энергии и вероятности возможной тонкой сложной структуры оптических переходов и их природа в моделях зон или метастабильных экситонов. Для их исследования необходимы существенно более полные экспериментальные и экспериментально-расчетные сведения об электронной структуре.

Общепринято, что наиболее полная информация об особенностях электронного строения кристалла в широкой области энергии заключена в обширном комплексе оптических фундаментальных функций. Принципиально новые и очень важные параметры (энергии и вероятности переходов) дает метод объединенных диаграмм Арганда [13]. Для алмаза известны спектры только некоторых оптических функций, которые заметно различаются по данным разных работ [3].

Цель настоящего сообщения состоит в получении полного комплекса оптических функций трех различных образцов алмаза, установления энергий и сил осцилляторов оптических переходов, а также их анализе и обсуждении природы в модели зон.

Методы расчетов

Полный комплекс оптических функций составляют коэффициенты отражения R и поглощения μ ; мнимая ε_2 и реальная ε_1 части диэлектрической проницаемости ε ; показатели поглощения k и преломления n ; интегральная функция связанной плотности состояний, умноженная на вероятность переходов, с точностью до постоянного множителя, равная $\varepsilon_2 E^2$; эффективное число валентных электронов $n_{ef}(E)$, участвующих в переходах до данной энергии E : эффективная диэлектрическая постоянная ε_{ef} ; функции характеристических потерь электронов для объемных ($-\text{Im} \varepsilon^{-1}$) и поверхностных ($-\text{Im} (1 + \varepsilon)^{-1}$) плазмонов, фаза θ отраженного света, электрооптические дифференциальные функции α и β . Все эти функции взаимосвязаны, но каждая из них имеет самостоятельное значение. Физический смысл и их взаимосвязь непосредственно вытекают из уравнений Максвелла [13].

Наиболее распространенный метод получения этого комплекса функций состоит в расчетах по специальным программам на основе известного экспериментального спектра отражения в широкой области энергии с помощью соотношений Крамерса–Кронига.

Задача определения параметров тонкой структуры спектра оптических переходов (энергии E_i и полуширины Γ_i полюсов компонент, силы их осцилляторов f_i)

[¶] E-mail: sobolev@uni.udm.ru

обычно решается одним из двух методов: 1) методом воспроизведения интегральной кривой спектра ε_2 набором лоренцевских N осцилляторов с большим количеством подгоночных параметров $3N$, доходящим до 30 для $N = 10$, 2) методом объединенных диаграмм Арганда также в классической модели лоренцевских осцилляторов, но без подгоночных параметров благодаря одновременному анализу спектров ε_2 и ε_1 .

Использованные в работе методы расчета полного комплекса оптических функций в разложении интегрального спектра ε_2 на элементарные компоненты подробно изложены в [3,13–16] и обсуждены в [17–19].

Расчеты комплекса оптических функций

Из анализа спектров пропускания в [20] определены энергии непрямых (E_{gi}) и прямых (E_{gd}) переходов алмаза при 295 К: $E_{gi} = 5.470$, $E_{gd} = 7.02$ эВ.

Спектр отражения алмаза при 300 К в области 4–23 эВ содержит слабый пик при ~ 7.1 эВ, интенсивный максимум при 12.85 эВ и очень широкое плато в интервале 16–20 эВ [21]. Отмечается, что коэффициент отражения необработанного и механически полированного образцов отличался не очень сильно с различиями для изученных образцов $\Delta R = 10\%$. Эти исследования были продолжены на полированных образцах типа II-a в области 4–30 эВ с погрешностью $\Delta R = 5\%$ [22]. В этой работе на месте плато [21] наблюдались два максимума при ~ 17 и 20.5 эВ, а вся кривая отражения [22] заметно ниже, чем в [21]. Повторные измерения в [23,24] в основном подтвердили результаты работы [21] о структуре спектра R . Исследования спектров отражения полированного образца (тип I) и скола (тип II-a) показали дополнительно, что самый длинноволновый слабый пик имеет дублетную структуру, т.е. помимо известного пика при ~ 7.1 эВ наблюдается пик при ~ 7.6 эВ, появляющийся при 90 К. Подробные исследования методами эллипсометрии при 90 К в высоком вакууме подтвердили наличие высокоэнергетической компоненты при ~ 7.6 –7.8 эВ [25].

Итак, спектры отражения работ [21,23,24] трех различных образцов алмаза заметно различаются, особенно по величине R в широкой области энергии и структуре длинноволнового пика. Естественно, это привело к различиям в спектрах остальных оптических функций, рассчитанных по спектрам отражения с помощью соотношений Крамерса–Кронига. К сожалению, в работах [21,23,24] приведены спектры не всех функций и отсутствует анализ их различий. В результате до сих пор для такого весьма популярного кристалла, как алмаз, нет ни полного комплекса оптических функций, ни анализа их зависимости от природы образца, хотя бы на примере трех измеренных в [21,23,24].

Нами рассчитаны полные комплексы оптических фундаментальных функций алмаза в области 0–34 эВ на основе спектров отражения образцов работы [23] (№ 1),

полированного образца типа I (№ 2) и скола типа II-a (№ 3) [24]. Всего получено 14 функций. Для краткости в настоящем сообщении рассмотрим только спектры R , ε_1 и ε_2 (рис. 1). На представленных рисунках наглядно видны различия в спектрах трех образцов.

Самый интенсивный максимум экспериментальных спектров отражения расположен при 12.85 (№ 1), 12.55 (№ 2) и 12.77 (№ 3) с $R \approx 0.65$ (№ 1), 0.64 (№ 2) и 0.55 (№ 3) соответственно. По форме длинноволновая часть этой полосы почти одинакова для трех образцов, а коротковолновая сильно различается, особенно для образцов № 1 и № 2. В области плато (16–18 эВ) данные R трех образцов очень сильно различаются по величине и форме кривой отражения. Длинноволновая компонента, полосы в окрестности 7.5 эВ расположена при ~ 7.25 (№ 1), 7.15 (№ 2) и 7.10 эВ (№ 3), а коротковолновая — при ~ 7.62 (№ 2) и 7.67 эВ (№ 3) (см. вставку на рис. 1, а). Итак, спектры отражения двух различных полированных образцов и скола очень сильно различаются в области 12.5–21 эВ. Наблюдаемое самое слабое отражение у скола обусловлено, видимо, несовершенствами поверхности скола. Существенно меньшее отражение образца № 1 по сравнению с образцом № 2, возможно, связано с особенностями примененных методик полировки. Непонятна природа заметного длинноволнового смещения интенсивного максимума у образца № 2 относительно максимума образцов № 1 и № 3 на ~ 0.3 и 0.2 эВ. Интенсивность длинноволновой компоненты слабого максимума отражения в области 7.10–7.25 эВ слабо зависит от температуры в интервале 90–300 К; коротковолновая компонента наблюдается только при 90 К [26].

К сожалению, в работах [21–26] не изучена структура поверхности образцов и даже не описаны методики полировки и скальвания, что существенно затрудняет обсуждение природы установленных различий спектров отражения трех образцов алмаза. Поэтому принципиально важны будущие исследования спектров отражения от поверхности алмаза, тщательно очищенной в высоком вакууме.

Одна из важнейших общих особенностей спектра ε_2 состоит в чрезвычайно сильном уменьшении ее значений в области энергии, большей энергии самого интенсивного максимума. Поэтому, как правило, даже интенсивные структуры отражения, расположенные в области больших энергий относительно самой сильной полосы, в спектре ε_2 совсем не проявляются. Как и ожидалось, расчетные кривые ε_2 трех образцов алмаза после максимума при ~ 11.8 эВ резко падают, что приводит к сильному их сближению во всей широкой области энергии, трансформации несимметричного интенсивного максимума отражения образца № 2 в симметричный и почти совпадению положения этого максимума трех различных образцов алмаза (рис. 1, б). Большое различие R в максимуме основной полосы отражения образцов № 2 и № 3 заметно уменьшилось в их кривых ε_2 , при этом

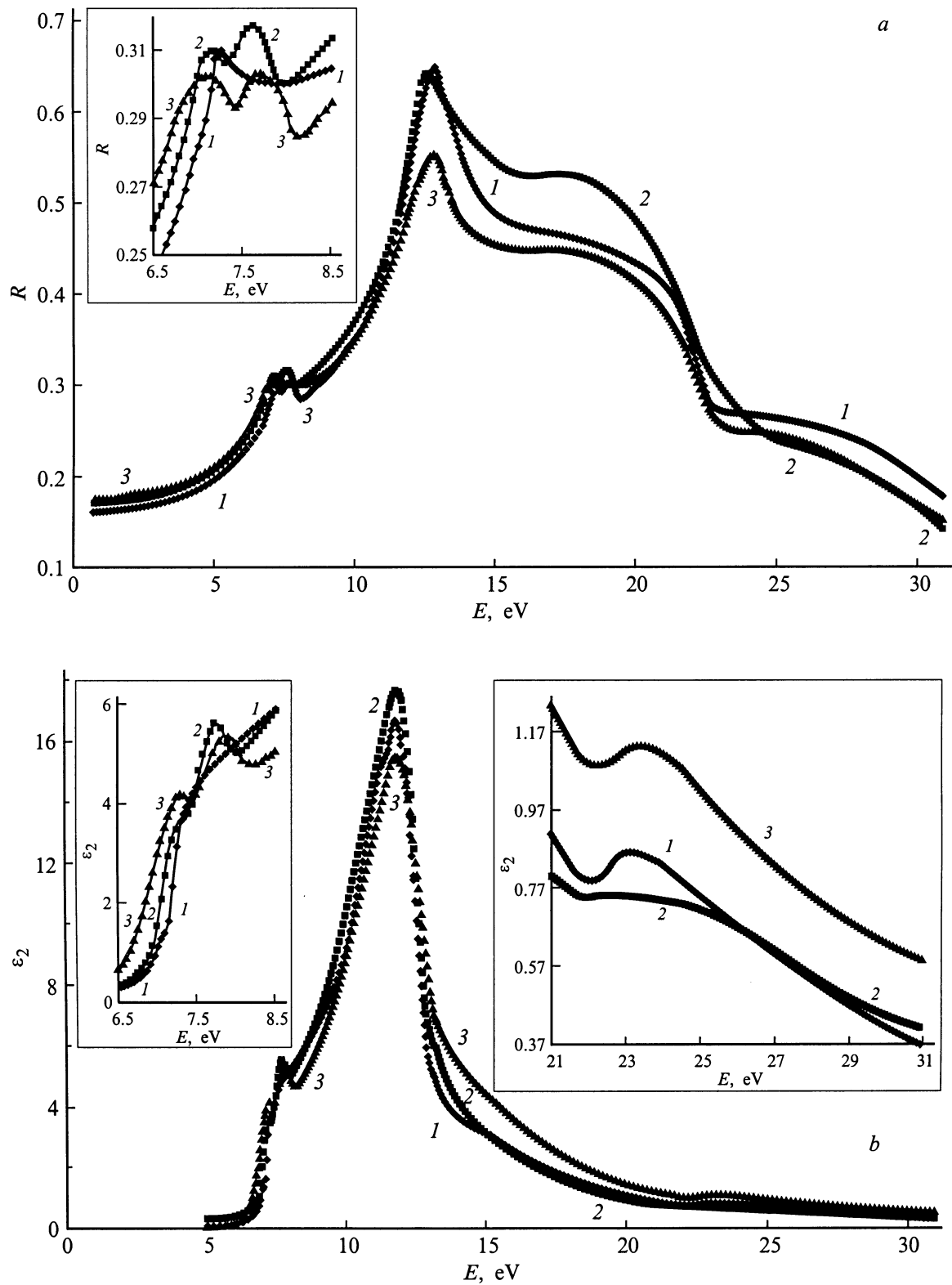


Рис. 1. Спектры отражения (а), ϵ_2 (б), ϵ_1 (с) трех образцов алмаза (№№ 1, 2, 3); на вставках — спектры в областях 6.5–8.5 и 21–31 эВ.

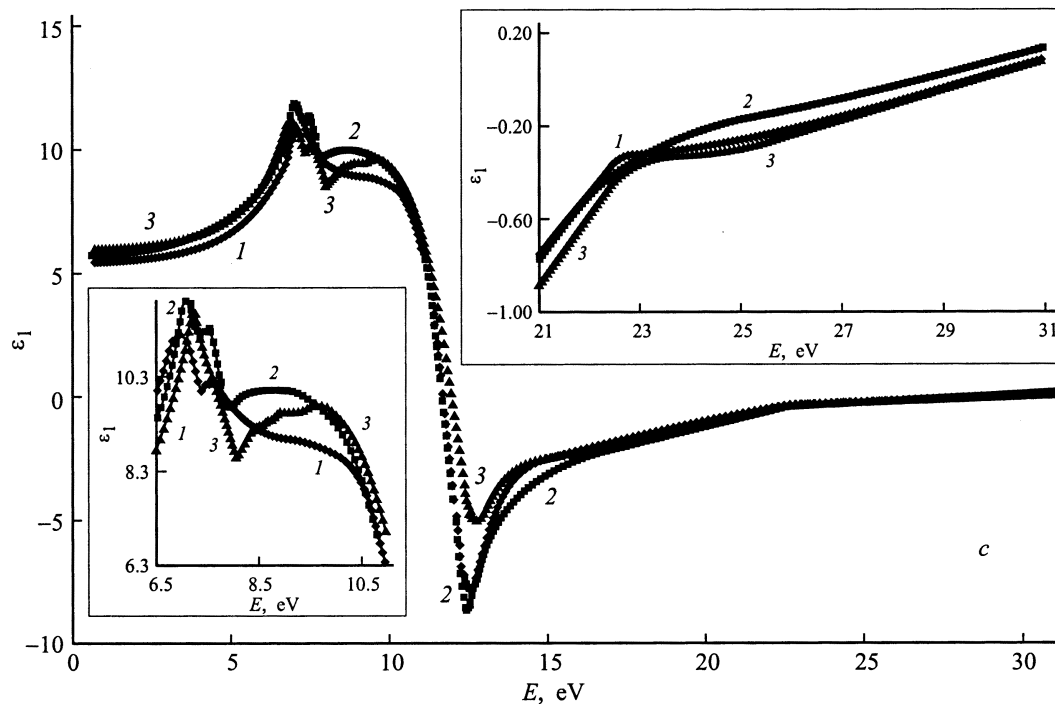


Рис. 1 (продолжение).

почти одинаковое R образцов № 1 и № 2 трансформировалось в заметное раздвижение по интенсивности их основного максимума в ε_2 . Эти нетривиальные особенности обусловлены в основном различиями их спектров отражения по интенсивности в области 13–20 эВ.

Широкое плато отражения в области 24–27 эВ преобразовалось в слабо выраженный максимум ε_2 при ~ 23.1 (№ 1), 23.6 (№ 2), и 23.5 эВ (№ 3) с $\varepsilon_2 \approx 0.8$ – 1.1 .

Длинноволновая полоса ε_2 состоит из очень слабо выраженных максимумов при ~ 7.5 (№ 1) и 7.3 эВ (№ 2), а также слабо выраженных максимумов при ~ 7.75 (№ 2), 7.3 (№ 3) и 7.9 эВ (№ 3) (см. вставку на рис. 1, *b*).

Самый интенсивный максимум ε_2 при ~ 11.8 эВ смещен в область меньших энергий на ~ 1 эВ, а слабая полоса в интервале ~ 7.2 – 7.8 эВ сдвинута в область больших энергий на ~ 0.20 эВ относительно их аналогов в спектре отражения.

Основная полоса отражения трансформируется спектре ε_1 в виде слабо выраженной широкой полосы при ~ 9.0 эВ и резкого отрицательного минимума при ~ 12.55 (№ 1), 12.45 (№ 2) и 12.75 эВ (№ 3), который расположен почти на месте максимума отражения. Самые длинноволновые максимумы ε_1 расположены при ~ 7.20 (№ 1), 7.05 и 7.50 (№ 2), 6.95 и 7.55 эВ (№ 3) (см. вставку на рис. 1, *c*), т.е. они смещены в область меньших энергий на ~ 0.1 – 0.2 и 0.3 эВ относительно их аналогов в спектрах R и ε_2 . С ростом энергии ε_1 после отрицательного минимума увеличивается и почти выходит на насыщение в области $E > 25$ эВ; $\varepsilon_1 = 0$ (т.е. $n = k$) при 29.5 эВ.

Итак, особенности образца алмаза очень сильно влияют на спектр отражения в широкой области энергии (особенно в области 12–22 эВ, в том числе на положение, интенсивность и форму полос), заметно проявляются в спектре ε_1 (особенно в интенсивности отрицательного минимума и структуре длинноволновой полосы) и сравнительно очень слабо в спектре ε_2 . Поэтому различие образцов наиболее эффективно можно изучать по спектрам отражения в области 12–22 эВ и спектрам ε_1 в области 6.5–9.5 эВ.

Разложение спектра ε_2 на компоненты

Экспериментальная кривая отражения и рассчитанные по ней спектральные кривые других оптических функций обусловлены результатом суммирования всех отдельных многочисленных переходов из занятых состояний в свободные по всему объему зоны Бриллюэна. Фундаментальная проблема принципиальной значимости заключается в решении обратной задачи: по интегральной кривой восстановить спектр элементарных переходов и определить параметры каждого из них (энергии максимума E_i и полуширины Γ_i полосы, ее силу осциллятора f_i). Общепринято теоретическое рассмотрение диэлектрической проницаемости как результат суммирования вкладов N отдельных лоренцевских осцилляторов с количеством параметров $3N$. Для любого кристалла общее количество этих параметров весьма велико. Поэтому, казалось бы, задача разделения интегральной кривой ε_2

Энергии максимумов полос E_i и полуширины Γ_i (эВ), силы осцилляторов f_i , ε_2 в максимуме полосы $\varepsilon_{2\max}$, площади полос S_i (эВ), энергии (эВ) и природа полос для образца № 2 алмаза по теории [6]

O_i	E_i	Γ_i	f_i	$\varepsilon_{2\max}$	S_i	S_i/S_{\max}	[6]
1	7.25	0.20	0.42	1.65	0.33	0.02	$\Gamma_{25'} - \Gamma_{2'}$, 7.0 (M_0)
2	7.75	0.60	1.05	3.69	2.21	0.13	$\Gamma_{25'} - \Gamma_{15}$, 8.1 (M_0); $\Lambda_3 - \Lambda_1$, 8.0
3	8.40	0.60	0.25	1.67	1.00	0.06	$\Delta_5 - \Delta_1$, 8.2; $L_{3'} - L_2$, 8.3 (M_1)
4	9.05	1.20	0.69	3.58	4.30	0.25	Переходы $4 \rightarrow 5$ в объеме зоны
5	9.60	0.70	0.15	1.89	1.32	0.08	Бриллюэна, 8.4–11.5; около K, U, X ,
6	10.35	1.30	0.75	7.32	9.52	0.55	$\Sigma_2 - \Sigma_3$, 11.0
7	11.10	0.80	0.26	5.77	4.62	0.27	
8	11.85	1.20	0.70	14.39	17.27	1.00	
9	12.30	0.30	0.03	3.05	0.92	0.05	$K_2 - K_3$, 11.7
9'	12.80	0.68	0.03	1.18	0.80	0.05	$X_4 - X_1$, 11.8 (M_1)
10	13.80	2.10	0.14	2.16	4.53	0.26	$\Lambda_3 - \Lambda_3$, 13.8 (M_1) (4–6)
11	16.00	2.70	0.13	1.51	4.09	0.24	$\Delta_5 - \Delta_{2'}$, 14.4 (M_2)
12	18.50	5.90	0.12	0.63	3.73	0.22	$\Sigma_2 - \Sigma_2$, 18.0; $\Gamma_{25'} - \Gamma_{2'}$, 19.0

на элементарные компоненты некорректна, неопределенна. Однако выход был найден благодаря уникальному свойству кривой $\varepsilon_2(E) = F(\varepsilon_1(E))$ для симметричного лоренциана (диаграмма Арганда): она имеет вид почти идеальной окружности, параметры которой однозначно определяют E_i, Γ_i, f_i . В случае кристалла получается сложная диаграмма Арганда благодаря наложению многих элементарных кругов. На основе известных спектров $\varepsilon_2(E)$ и $\varepsilon_1(E)$ строится общая диаграмма Арганда, из которой последовательно, начиная с самого интенсивного и изолированного максимума ε_2 , выделяются отдельные полосы с последующей оптимизацией этого разложения.

На основе полученных нами спектров $\varepsilon_2(E)$ и $\varepsilon_1(E)$ трех образцов алмаза было выполнено разложение $\varepsilon_2(E)$ на элементарные компоненты и определены параметры E_i, Γ_i, f_i . Всего установлено 13 компонент в области 6–27 эВ, причем их энергии E_i очень слабо отличаются для этих трех различных образцов алмаза, а различия сил осцилляторов находятся с интервале $\pm(5-25)\%$. Для краткости остановимся на данных для образца № 2 (см. таблицу; интенсивность полос оценена через f_i с учетом $n_{ef}(E)$, а также с помощью площади полос S_i и отношения S_i/S_{\max} ; $\varepsilon_{2\max}$ — значение ε_2 в максимуме полосы).

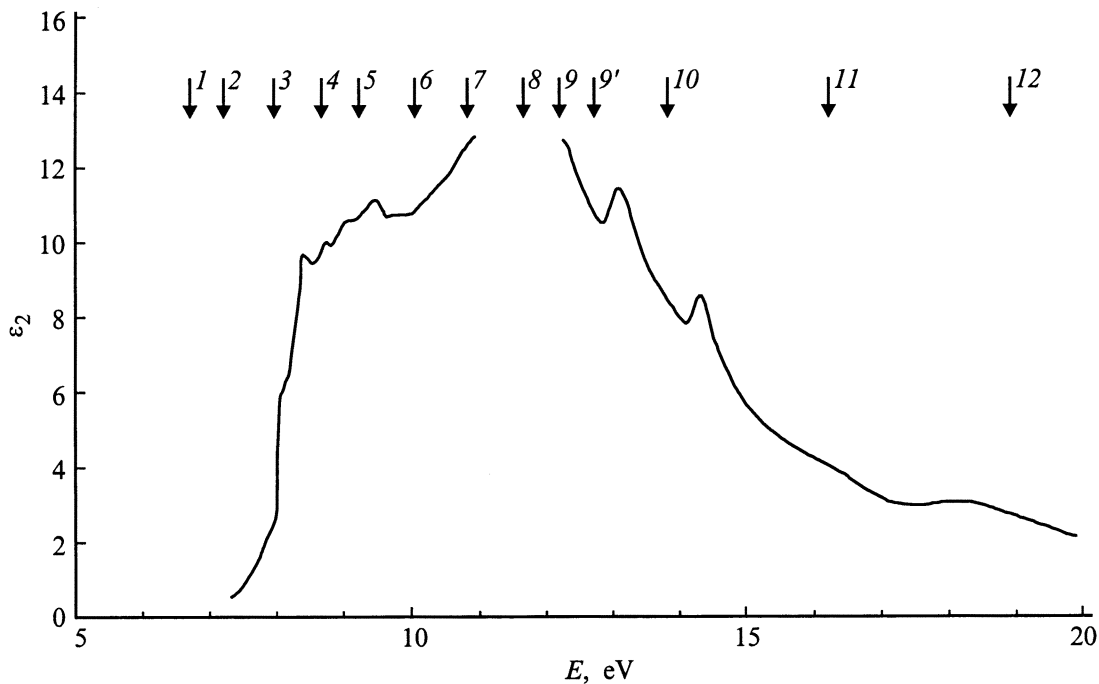


Рис. 2. Теоретический спектр ε_2 алмаза [6] (сплошная кривая); стрелками обозначены энергии выделенных осцилляторов O_i .

Зоны алмаза теоретически рассмотрены во многих работах [3–13]. Однако только в одной из них [6] содержатся обширные данные для $\varepsilon_2(E)$ и схема зон, наиболее пригодные для детального сопоставления с опытными результатами. В этой работе методом нелокального эмпирического псевдопотенциала рассчитаны зоны алмаза по многим направлениям зоны Бриллюэна, а также спектр $\varepsilon_2(E)$ в области 6–20 эВ. Теоретически поглощение начинается с переходов $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{2'}$ при 7 эВ (критическая точка типа M_0), за которыми следует большая группа переходов ($\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{15}$ (8.2 эВ, M_0); $\Lambda_3 \rightarrow \Lambda_1$ (8 эВ); $\Delta_5 \rightarrow \Delta_1$ (8.2 эВ); $L_{3'} \rightarrow L_{2'}$ (8.3 эВ, M_1)). Кривая $\varepsilon_2(E)$ в области 8.4–11.5 эВ формируется многими переходами из верхней валентной зоны в нижнюю зону проводимости (переходы $4 \rightarrow 5$) в большом объеме зоны Бриллюэна около точек K, U, X , благодаря которым в спектре $\varepsilon_2(E)$ могут быть четыре максимума. Традиционно для ковалентных тетраэдрических полупроводников самый интенсивный максимум $\varepsilon_2(E)$ образуют переходы на направлении Σ ($\Sigma_2 \rightarrow \Sigma_3$, 11 эВ). При больших энергиях вклад дают переходы в точках $K, X, \Lambda, \Delta, \Sigma, \Gamma$. Для каждого из установленных нами 13 переходов ($O_i, i = 1-13$), как правило, возможны два-три варианта конкретной природы согласно теоретической схеме зон работы [6]. Они приведены в таблице. Происхождение этих осцилляторов можно обсуждать также и в модели метастабильных экситонов. Благодаря отсутствию теоретических расчетов спектра метастабильных экситонов приходится ограничиваться моделью междузонных переходов. На рис. 2 стрелками отмечены положения установленных нами осцилляторов O_i относительно максимумов теоретической кривой $\varepsilon_2(E)$. Следует подчеркнуть, что очень хорошее согласие теории [6] с нашими опытными расчетными данными наблюдается только по энергетической структуре, но не по интенсивности переходов. Очень важно в дальнейших теоретических расчетах определить интенсивности отдельных переходов.

В заключение очень кратко остановимся на результатах других работ детализации спектров оптических функций алмаза в области 0–20 эВ для $n(E)$ и $k(E)$ [27], 0–25 эВ для $\varepsilon_1(E), \varepsilon_2(E), n(E), k(E), R(E)$ [28], 5–200 эВ для $R(E)$ [29]. Интегральные кривые воспроизведены (не разложены!) в них при помощи большого количества подгоночных параметров: 16-ти [27], 11-ти [28] и 12-ти [29]. В этих работах кроме модели симметричных лоренцевских осцилляторов дополнительно приняты весьма существенные упрощения и предположения, которые неоспорны. Например, предположение о параболичности всех зон в широкой области энергии, хотя известно, что это может быть справедливо лишь в очень узкой окрестности вблизи точки Γ . Среди выбранных осцилляторов в работе [29] отсутствует самый интенсивный при 11.8 эВ. Это лишний раз подтверждает преимущества беспараметрического метода объединенных диаграмм Арганда при разложении интегрального спектра $\varepsilon_2(E)$ на элементарные компоненты.

В настоящем сообщении впервые вместо четырех максимумов отражения установлены тринадцать полос наиболее интенсивных переходов алмаза в области 6–30 эВ, определены их параметры и предложена схема их конкретной природы в модели зон. Кроме того, получены полные комплексы оптических фундаментальных функций трех различных образцов алмаза и дан анализ их особенностей. Эти результаты позволяют существенно глубже и детальнее анализировать электронную структуру алмаза, создают принципиально новую основу для дальнейших более точных теоретических расчетов зон, экситонов и свойств алмаза.

Работа выполнена при поддержке Центра фундаментального естествознания (Санкт-Петербургский университет).

Список литературы

- [1] С.В. Вавилов, А.А. Гишпиус, Е.А. Конорова. *Электронные и оптические процессы в алмазе* (М., Наука, 1985).
- [2] В.К. Баженов, И.М. Викулин, А.Г. Гонтарь. *ФТП*, **19**, 1345 (1985).
- [3] В.В. Соболев. *Собственные энергетические уровни твердых тел группы A^4* (Кишинев, Штиинца, 1978).
- [4] А.А. Левин. *ФТП*, **3**, 1864 (1969).
- [5] F. German, R.L. Kortum, C.D. Kuglin. *Int. J. Quant. Chem.*, **1S**, 533 (1967).
- [6] L.A. Hemstreet, C.Y. Fong, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **2**, 2054 (1970).
- [7] A.R. Lubinsky, D.E. Ellis, G.A. Painter. *Phys. Rev. B*, **6**, 3950 (1972).
- [8] H.J. Mattausch, W. Hanke, G. Strinati. *Phys. Rev. B*, **27**, 3735 (1983).
- [9] B. Adolph, V.J. Gavrilenko, K. Tenelsen, F. Bechstedt, R. Del Sole. *Phys. Rev. B*, **53**, 9797 (1996).
- [10] V.J. Gavrilenko, F. Bechstedt. *Phys. Rev. B*, **55**, 4343 (1997).
- [11] F. Bechstedt, K. Tenelsen, B. Adolph, R. Del Sole. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 1528 (1998).
- [12] L.X. Benedict, E.L. Shirley, R.B. Bohn. *Phys. Rev. B*, **57**, R9385 (1998).
- [13] В.В. Соболев, В.В. Немошкаленко. *Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников* (Киев, Наук. думка, 1988).
- [14] В.В. Соболев. *ЖПС*, **63**, 143 (1993).
- [15] В.В. Соболев, С.А. Алексеева, В.Л. Горенберг. *ФТП*, **12**, 2110 (1978).
- [16] В.В. Соболев, В.Вал. Соболев. *ФТТ*, **36**, 2560 (1994).
- [17] В.В. Соболев, В.И. Донецких, Е.Ф. Загайнов. *Тез. докл. между. совещ. "Экситоны в полупроводниках"* (Л., 1977) с. 46.
- [18] E.L. Busygina, V.V. Sobolev. *Abstracts Int. Conf. "Optics of Excitons in Condensed Matter"* (St.Petersburg, 1997) p. 70.
- [19] В.В. Соболев. *Тр. Между. конф. "Оптика полупроводников"* (Ульяновск, Изд-во Ульян. ун-та, 1998) с. 3.
- [20] C.D. Clark, P.J. Dean, P.V. Harris. *Proc. Roy. Soc. A*, **277**, 312 (1964).
- [21] H.R. Philipp, E.A. Taft. *Phys. Rev.*, **127**, 159 (1962).
- [22] W.C. Walker, J. Osantowsky. *Phys. Rev. A*, **134**, 153 (1964).
- [23] H.R. Philipp, E.A. Taft. *Phys. Rev. A*, **136**, 1445 (1964).

- [24] R.A. Roberts, W.C. Walker. Phys. Rev., **161**, 730 (1967).
- [25] S. Logothetidis, J. Petalas, H.M. Polatoglou, D. Fuchs. Phys. Rev. B, **46**, 4483 (1992).
- [26] R.A. Roberts, D.M. Roessler, W.C. Walker. Phys. Rev. Lett., **17**, 302 (1966).
- [27] A.R. Forouhi, J. Bloomer. Phys. Rev. B, **38**, 1865 (1988).
- [28] A.D. Papadopoulos, E. Anastassakis. Phys. Rev. B, **43**, 5090 (1991).
- [29] J. Nithianandam, J.C. Rife. Phys. Rev. B, **47**, 3517 (1993).

Редактор В.В. Чалдышев

Fine structure of the diamond dielectric function spectrum

V.V. Sobolev, A.P. Timonov, V.Val. Sobolev

Udmurt State University,
426034 Izhevsk, Russia

Abstract Spectra of the full set of optical functions for three different diamond samples were obtained in the range from 0 to 32 eV. The calculations were based on the reflectivity spectra by means of the Kramers–Kronig method. The analysis of the spectral peculiarities was carried out. The dielectric functions of three samples were decomposed for the first time into 13 components by the method of combined Argand diagram. The component energies and oscillator strengths were found. There was good agreement between the experimental results and theoretical data available.