

Непрямые межзонные переходы графита с большой энергией квазищели

© В.В. Соболев[¶], Е.А. Антонов, В. Вал. Соболев*

Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

* Ижевский государственный технический университет,
426069 Ижевск, Россия

(Получена 18 декабря 2009 г. Принята к печати 11 марта 2010 г.)

Впервые определены комплексы фундаментальных оптических функций в области 0–40 эВ для продольных непрямых межзонных переходов графита с квазищелью до 2.6 эВ. Их структура и параметры сильно зависят от величины переданного волнового вектора электронов \mathbf{q} . Предложена природа их максимумов и ступенек по модели теоретических смещенных зон для четырех значений переданного волнового вектора \mathbf{q} электронов в объемных характеристических потерях энергии для направления Γ – P зоны Бриллюэна. Расчеты выполнены на основе известных экспериментальных спектров объемных характеристических потерь энергий электронов графита в области 0–40 эВ для $|\mathbf{q}| = 0.00, 0.375, 0.625$ и 1.00 \AA^{-1} с помощью пакета компьютерных программ.

1. Введение

Межзонный переход имеет две компоненты: поперечную и продольную. Обычно первая из них возбуждается только светом, а вторая — потоком быстрых электронов [1,2]. Кроме того, различают прямые и непрямые переходы. При оптическом возбуждении интенсивность непрямых переходов на несколько порядков меньше интенсивности прямых переходов. Поэтому в области энергии $E > E_g$ ими пренебрегают. Но в спектре характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ) они весьма интенсивны в широкой области энергии для любых переданных волновых векторов $|\mathbf{q}|$ потока электронов, рассеянного в образце ($|\mathbf{q}| > 0$) [3–8].

Структуру экспериментальных, экспериментально-расчетных и теоретических спектров объясняют, применяя модель межзонных переходов между парами зон, параллельных в наиболее протяженных участках зоны Бриллюэна. Большой недостаток такой общеринятой модели состоит в том, что она применяется не для всех зон и в ограниченных участках зоны Бриллюэна. Он может быть, по крайней мере частично, уменьшен, если использовать информацию из непрямых переходов потерь электронов для серии значений $|\mathbf{q}| > 0$.

Верхние валентные зоны известны сравнительно хорошо, а многие зоны проводимости — гораздо хуже. Актуальность спектра потерь электронов $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ заключается в том, что он предоставляет возможность развить новый метод зондирования зон проводимости относительно верхних валентных зон и существенно дополнить информацию, обычно получаемую оптическими методами.

Спектр потерь электронов состоит из сравнительно слабо выраженных полос межзонных переходов и очень интенсивных полос плазмонов.

Первичная экспериментально измеряемая функция потерь электронов содержит $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ как один из нескольких множителей, выделение которого составляет непростую задачу. Поэтому часто данные потерь электронов представляют в шкале относительных единиц для $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$ или другой функции потерь, которые достаточны для анализа особенностей полос плазмонов, но не пригодны для определения спектра $\varepsilon(E, \mathbf{q})$. Весьма показательны теоретические расчеты функций $\varepsilon(E, \mathbf{q})$ и $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ графита в обширной статье [8]: для $|\mathbf{q}| > 0$ они в основном посвящены дисперсии плазмонов, а непрямые межзонные переходы совсем не рассматриваются.

Из всех многочисленных экспериментальных исследований функции потерь электронов $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ в широкой области энергии $E > 10$ эВ известны лишь для графита [3,4] в BN [4]. В этих работах приведены спектры $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$ для нескольких значений переданного волнового вектора \mathbf{q} в области 0–40 эВ и спектры $\varepsilon_2(E)$, рассчитанные по соотношениям Крамерса–Кронига. Спектры непрямых межзонных переходов для $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$ и ε_2 содержат интенсивные максимумы. Их особенности в работе [3] предложено рассматривать по модели валентных зон, смещенных относительно зон проводимости на величину $|\mathbf{q}|$. В этом случае непрямые переходы автоматически трансформируются в прямые переходы, что значительно облегчает определение их свойств. В работе [3] эта модель приведена для простейшего случая одной верхней валентной зоны и одной нижней зоны проводимости. Самое оригинальное в ней — это демонстрация появления квазищели графита при $|\mathbf{q}| > 0$, т.е. как бы проявление квазифазового перехода полуметалл–полупроводник. В работе [4] повторены данные работы [3], более четко приведены спектры потерь в области небольших энергий, а также упрощенно повторена идея применения модели смещенных зон на одном примере значения $|\mathbf{q}|$. При общем согласии дан-

[¶] E-mail: sobolev@uni.udm.ru

ных обеих работ [3,4] положения максимумов спектров заметно различаются.

Новизна работы состоит в наиболее полном определении энергий полос продольных не прямых межзонных переходов комплекса оптических функций графита для направления Γ – P зоны Бриллюэна, установлении природы этих полос и энергий квазищели в окрестности точки P в зависимости от величины $|\mathbf{q}|$ переданного электронами волнового вектора.

Энергии межзонных переходов графита на направлении P – Q очень большие, а дисперсия зон сравнительно невелика. Поэтому модель смещенных зон, предложенная в работах [3,4], для него не представляет важной информации. Зато принципиальный интерес могут содержать результаты по схеме смещенных зон для направления Γ – P : в этом случае ожидается появление квазищели в окрестности точки P , т.е. фазового перехода графита полуметалл–полупроводник в продольных межзонных не прямых переходах, и большие изменения в энергиях межзонных переходов для больших величин $|\mathbf{q}|$.

2. Методики расчетов

Общеизвестно, что наиболее полные сведения об электронном строении полупроводника предоставляют спектры комплекса большого количества оптических фундаментальных функций [2,9]: мнимой (ε_2) и реальной (ε_1) частей диэлектрической проницаемости; коэффициентов отражения (R) и поглощения (α): реальных ($\text{Re} \varepsilon^{-1}$, $\text{Re}(1 + \varepsilon)^{-1}$) и мнимых ($\text{Im} \varepsilon^{-1}$, $\text{Im}(1 + \varepsilon)^{-1}$) частей функций $1/\varepsilon$ и $1/(1 + \varepsilon)$; показателей преломления (n) и поглощения (k); интегральной функции связанной плотности состояний, которая с точностью до постоянного множителя равна $\varepsilon_2 E^2$ при постоянстве вероятности переходов; эффективного количества валентных электронов $n_{\text{eff}}(E)$, участвующих в переходах до заданной энергии E ; оптической проводимости σ и др. Все эти функции взаимосвязаны, но каждая из них имеет самостоятельное значение. Физический смысл и их взаимосвязь непосредственно вытекают из общих уравнений Максвелла.

Определение большинства оптических функций полного их комплекса составляет первую фундаментальную задачу спектроскопии. Их анализ позволяет установить наиболее полно общие и детальные особенности различных оптических функций, в том числе наиболее полно выявить энергии максимумов и ступенек полос переходов.

Интенсивность спектра $\varepsilon_2(E)$ графита с ростом энергии в области энергии $E > 20$ эВ в интервале 5–11 эВ очень быстро падает. Это не позволяет выявлять максимумы полос в области 20–40 эВ и существенно затрудняет определение слабо выраженных структур в интервале 5–11 эВ. Другие функции (α , $\varepsilon_2 E^2$, k) сохраняют высокую интенсивность в широкой области энергии $E > 15$ эВ. Поэтому в них наиболее четко проявляется

наибольшее количество полос переходов. Кроме того, они предоставляют сведения о коэффициенте поглощения и комбинированной плотности состояний. Это свидетельствует об ошибочности распространенного, особенно среди теоретиков, мнения о том, что вместо всего комплекса функций достаточно знать только одну функцию $\varepsilon_2(E)$.

Обычно комплекс оптических функций определяют по специальным программам с помощью интегральных соотношений Крамерса–Кронига и аналитических формул связи между функциями на основе известной экспериментальной какой-либо одной функции для широкой области энергии.

Использованные в работе методы расчетов подробно изложены в [2] и обсуждены в [9–11].

3. Результаты расчетов и их обсуждение

Спектры $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ графита измерены для направлений Γ – P и Γ – Q в областях 0–20 [3] и 0–40 эВ [4] для восьми значений $|\mathbf{q}|$ до $|\mathbf{q}| = 1.4$ [3] и 1.0 \AA^{-1} [4]. На их основе были рассчитаны спектры ε и ε_1 [3], ε_2 [4]. Наиболее полные спектры потерь электронов приведены в работе [4]. Для $|\mathbf{q}| \approx 0$ квазищель в окрестности точки P $\Delta E \approx 0$ [8,12–14]. С ростом $|\mathbf{q}|$ квазищель увеличивается и достигает в не прямых переходах до ~ 2.6 эВ. В работе [4] она ошибочно сильно завышена (до ~ 3.5 эВ). Полученные данные об энергиях квазищели ΔE и максимумов $\varepsilon_2(E, \mathbf{q})$ объясняются на примере простейшей модели смещенных зон для $|\mathbf{q}| = 0.75 \text{ \AA}^{-1}$, состоящей из одной верхней валентной зоны и одной нижней зоны проводимости. Наиболее характерные особенности спектров потерь электронов проявляются для $|\mathbf{q}| = 0, 0.375, 0.625$ и 1.00 \AA^{-1} для направления Γ – P зоны Бриллюэна.

Цель работы состоит в определении комплексов фундаментальных оптических функций не прямых межзонных переходов графита в области 0–40 эВ с квазищелью до 2.6 эВ, наиболее полного набора полос переходов и их природы для направления Γ – P на примере четырех значений $|\mathbf{q}|$.

Комплексы оптических функций графита для $|\mathbf{q}| = 0$ (1), 0.375 (2), 0.625 (3) и 1.00 \AA^{-1} (4) рассчитаны на основе экспериментальных спектров $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$ работы [4]. Они содержат от четырех до восьми структур (максимумов и ступенек) (см. рис. 1 и таблицу).

Спектр характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ) при малом изменении переданного волнового вектора \mathbf{q} почти идентичен спектру $-\text{Im}[\varepsilon(E, \mathbf{q})]^{-1}$, рассчитанному по экспериментальному оптическому спектру отражения [1,10–12]. При этом структуры спектров ε_2 , $\varepsilon_2 E^2$, k , α , σ и R расположены при больших энергиях, чем структуры n , ε_1 , с ростом энергии кривые ε_1 , n , ε_2 сильно падают, а кривые α , σ , $\varepsilon_2 E^2$, напротив, содержат самые интенсивные полосы в области

Энергии (эВ) максимумов и ступенек (в скобках) оптических функций графита для Γ - P и четырех $|\mathbf{q}|$ (\AA^{-1}) и теоретические энергии E_i переходов

N	$ \mathbf{q} , \text{\AA}^{-1}$	$E_i, V_i \rightarrow C_j$	R	n	k	ε_1	ε_2	α	$E^2 \varepsilon_2$	$-\text{Im} \varepsilon^{-1}$	$-\text{Im}[1 + \varepsilon]^{-1}$	σ
1	0	—	1.2	0.55	0.9	0.6	0.6	1.2	—	(1-3)	(1-3)	0.7
2		4.6, $V_3-C_1(Q)$	5.15	(3.18)	4.5	2.6	3.6	4.95	4.5	—	—	4.1
3		13.5, V_1-C_2	13.1	12.7	(13.1)	11.8	(12.4)	(13.0)	(12.8)	(14.0)	(13.7)	(13.0)
4		15.4, $V_{3,4}-C_1$	17.9	(15.4)	16.3	(15.1)	15.5	16.7	15.7	—	—	15.5
1	0.375	1.8, 2.5, $V_{1,2}-C_1$	1.7	1.5	1.7	1.5	1.6	1.7	2.3	(3.4)	(3.4)	1.6
2		2.9, 3.5, $V_{1,2}-C_1$	5.6	3.9	4.8	3.8	4.3	5.3	5.1	—	—	4.5
3		12.4, V_4-C_1 ; 10.8, V_3-C_1	12.7	11.4	12.6	11.4	12.4	(12.9)	(11.7)	(13.9)	(13.9)	12.4
4		13.5, V_2-C_1	(14.5)	(14.5)	15.4	(14.5)	(14.9)	—	—	—	—	14.6
5		15.3, $V_{1,2}-C_{1,2}$	16.5	—	—	—	—	16.2	15.9	—	—	—
6		17.0, $V_{3,1}-C_1$	(19.9)	—	—	—	—	(19.6)	—	—	—	—
1	0.625	3.2, $V_{1,2}-C_1$	3.1	2.65	—	2.5	3.65	—	—	—	—	—
2		—	3.75	—	—	—	—	—	—	—	—	—
3		—	(4.7)	—	4.7	—	—	(5.0)	—	—	—	4.4
4		5.4, $V_{1,2}-C_1$	5.05	—	(5.5)	—	—	6.5	7.7	—	—	(5.3)
5		10.0, V_1-C_1	(6.4)	—	—	—	—	—	(8.3)	—	—	—
6		13.5, $V_{1,2}-C_1$	14	11.9	14	11.6	13	(14.3)	(14.7)	(15.1)	(14.7)	13.6
7		17.2, V_3-C_1	(17.0)	(15.6)	16.7	(15.3)	16	17.9	—	—	—	16.2
8		18.8, V_4-C_1	18.9	—	—	—	—	—	18.9	(21.4)	(21.4)	—
1	1	6.1, $V_{1,2}-P_1$	(4.8)	4.3	—	3.8	5.4	(6.1)	(5.0)	—	—	—
2		7.3, $V_{1,2}-C_1$	5.4	—	5.7	—	—	—	—	(6.6)	(6.6)	5.6
3		8.6, $V_{1,2}-C_1$	(8.0)	(7.0)	(8.0)	(7.0)	(8.0)	8.8	8.7	—	—	7.9
4		15.0, V_1-C_1	14.7	13.1	15.1	12.8	14.7	(15.3)	—	(17.5)	(16.9)	14.7
5		17.7, V_2-C_2	(19.0)	(18.6)	20.1	(17.9)	19.8	21.7	17	—	—	20.1
6		20.0, V_4-C_1	(19.0)	(18.6)	20.1	(17.9)	19.8	21.7	17	—	—	20.1

10–30 эВ и др. Эти характерные особенности относительного расположения структур различных оптических функций и спектрального распределения их интенсивности сохраняются в основном для широкого интервала изменения волнового вектора \mathbf{q} . Его увеличение до большого значения $|\mathbf{q}| = 1 \text{\AA}^{-1}$ приводит к уменьшению значений многих оптических функций до ~ 3 –6 раз в области энергий $E < 3$ эВ и до ~ 2 раз в остальной области. Это свидетельствует о том, что невертикальные межзонные переходы, возбуждаемые потоком электронов, даже при больших изменениях их волнового вектора сохраняют очень высокую интенсивность. При этом четкость проявления структур в виде максимумов и ступенек может быть сильно неодинаковой для разных оптических функций, как и при оптическом возбуждении прямых межзонных переходов.

В результате анализа полученных данных установлено большое сходство многих особенностей спектров оптических функций графита, рассчитанных при возбуждении переходов светом и потоком электронов. Это позволяет предположить, что природа структур рассматриваемых спектров оптических функций с одинаковым номером в таблице аналогична для данного $|\mathbf{q}|$. В случае оптического возбуждения переходов это общепринято и известно для многих кристаллов [2,9,11,12].

Какова конкретная природа структур полученных спектров оптических функций графита для различных $|\mathbf{q}|$? Общепринято в модели зон, что максимумы и ступеньки оптических функций обусловлены прямыми переходами между парой зон (валентной зоны V_i и зоной проводимости C_j), которые почти параллельны на протяженном участке зоны Бриллюэна. Это справедливо и для невертикальных переходов при их возбуждении потоком электронов. С ростом величины $|\mathbf{q}|$ наклон таких переходов сильно увеличивается. Схема рассмотрения таких переходов существенно упрощается в модели смещенных зон, т. е. зон валентных, смещенных относительно зон проводимости на величину $|\mathbf{q}|$, как это качественно для одной пары зон графита предположено в [3,4].

Зоны графита теоретически и экспериментально исследованы во многих работах [8,12–14]. Наиболее корректно они представлены в [13]. На рис. 2, а приведена часть зон в интервале ± 15 эВ, $|\mathbf{q}| = 0$. Дублетные верхняя валентная зона V_1, V_2 опускается из P_3^- ($E = 0$) в точку Γ (Γ_{2u}^-), а вторая зона V_3, V_4 поднимается из P_1^+ и P_3^+ в точку Γ_{3g}^+ . Самая нижняя дублетная зона проводимости C_1 поднимается из точки P (P_3^-) в точку Γ_{2g}^- , вторая зона проводимости C_2 ($\Gamma_{3u}^+ - P_3^+$) состоит из пяти близко расположенных подзон. Выше их находится зона C_3 ($\Gamma_{1u}^- - P_1^+$). Теоретически величина E_g

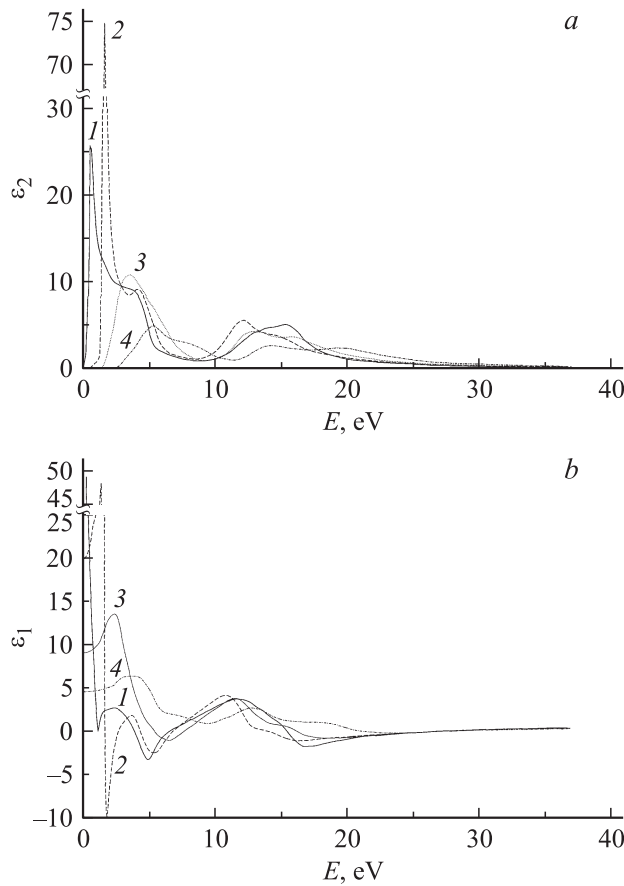


Рис. 1. Спектры ϵ_2 (a), ϵ_1 (b) графита для переходов на направлении $\Gamma-P$ и $|\mathbf{q}| = 0$ (1), 0.375 (2), 0.625 (3) и 1.0 \AA^{-1} (4).

графита очень мала и равна $\sim 0-0.1 \text{ эВ}$ в точке P_3^- . На трех других рисунках (рис. 2, b, c, d) валентные зоны смещены на величину $|\mathbf{q}|$. Поиск возможных наиболее интенсивных максимумов полос межзонных переходов выполнен общепринятым упомянутым методом почти параллельных зон. Этим методом оценены их энергии и локализации в точках направления $\Gamma-P$ зоны Бриллюэна; энергии полос отмечены вертикальными прямыми, а их локализации в точках направления $\Gamma-P$ — горизонтальными прямыми (данные $N, E_i, V_i \rightarrow C_j$ таблицы).

Экспериментальная кривая СХПЭЭ для $|\mathbf{q}| = 0$ начинается с $E \approx 0$ и с ростом энергии быстро выходит на насыщение в области до $\sim 2.6 \text{ эВ}$. В расчетных оптических спектрах она преобразуется в полосу с максимумом № 1 (0.6–1.2 эВ), природа которого связана, возможно, с переходами в окрестности точки P на направлении $P-Q$. При больших энергиях наблюдаются хорошо выраженные три структуры (№№ 2–4). Две из них (№№ 3, 4) обусловлены переходами в больших интервалах точек направления $\Gamma-P$, а полоса № 2 — переходами, видимо, в окрестности точки Q .

Для $|\mathbf{q}| > 0$ открывается квазищель графита в широкой окрестности точек около P с возможным наборо-

ром полос переходов в количестве до четырех между зонами V_1, V_2 и слабо дублетной C_1 . Она достигает величины $\sim 2.6 \text{ эВ}$ для $|\mathbf{q}| = 1 \text{ \AA}^{-1}$. Это означает, что при характеристических потерях с волновым вектором $|\mathbf{q}| > 0$ возбуждаются потоками быстрых электронов интенсивные не прямые переходы графита как полупроводника с широким интервалом изменения квазищели в окрестности точки P .

С ростом параметра $|\mathbf{q}|$ рассеянных графитом электронов энергия и природа переходов и их локализация меняются. Для многих максимумов полос и ступенек оптических функций, рассчитанных по $-\text{Im}[\epsilon(\mathbf{q}, E)]^{-1}$, определены возможные полосы межзонных переходов в модели смещенных зон (см. таблицу, рис. 2). По величине энергии E_i эти теоретические возможные полосы отличаются от положений структур рассчитанных оптических функций ($\epsilon_2, \alpha, \epsilon_2 E^2$) на $\Delta E_a \approx 0.1-1$ ($|\mathbf{q}| = 0, 0.375$), $0.5-1$ ($|\mathbf{q}| = 0.625$), $0.2-0.6 \text{ эВ}$ ($|\mathbf{q}| = 1 \text{ \AA}^{-1}$).

Согласно экспериментальным данным по фотоэмиссии, положения теоретических зон проводимости C_2 и C_3 занижены в точке Γ относительно точки P_3^- на $\Delta E_b = 1.7 \pm 0.5 \text{ эВ}$ [14]. Среднее значение $\Delta E = \Delta E_b - \Delta E_a$ находится в интервале (1.0–1.3) эВ ($\pm 1.0 \text{ эВ}$), т.е. в пределах погрешностей теоретических расчетов зон и данных фотоэмиссии. Это подтверждает сравнительно высокую точность теоретических зон графита на направлении $\Gamma-P$ работы [13], непротиворечивость полученных данных об энергиях полос переходов E_i и их локализация в точках направления $\Gamma-P$, а также применимость метода зависимости спектров комплекса оптических функций в случае возбуждения непрямыми переходами потоком быстрых электронов от их переданного волнового вектора \mathbf{q} для зондирования дисперсии зон.

Из всего обширного комплекса оптических функций выделяется группа, наиболее непосредственно связанная с поглощением энергии и межзонными переходами: $\epsilon_2, \epsilon_2 E^2, \alpha, k, \sigma$. При малых величинах переданного волнового вектора неупруго рассеянных быстрых электронов для графита они очень малы для $E \approx 0$ в точке P . С ростом изменения $|\mathbf{q}|$ их длинноволновый край смещается в область энергии $E > 0$, открывается область „прозрачности“ графита до $\sim 2.6 \text{ эВ}$ при $|\mathbf{q}| = 1.00 \text{ \AA}^{-1}$ (в процессах неупругого рассеяния быстрых электронов!). При этом заметный рост количества валентных электронов, участвующих в межзонных переходах, начинается даже при больших энергиях: $\sim 3.5-4 \text{ эВ}$.

Аналогичные расчеты были выполнены для второго наиболее актуального направления зоны Бриллюэна графита: $\Gamma-Q$. И в этом случае установлено смещение длинноволнового края спектров ϵ_2 в область больших энергий и открытие области „прозрачности“ графита в случае увеличения изменения переданного волнового вектора электронов. Естественно предположить, что этот эффект перехода полуметалл–полупроводник характерен для любых направлений зоны Бриллюэна графита, если переданный волновой вектор быстрых

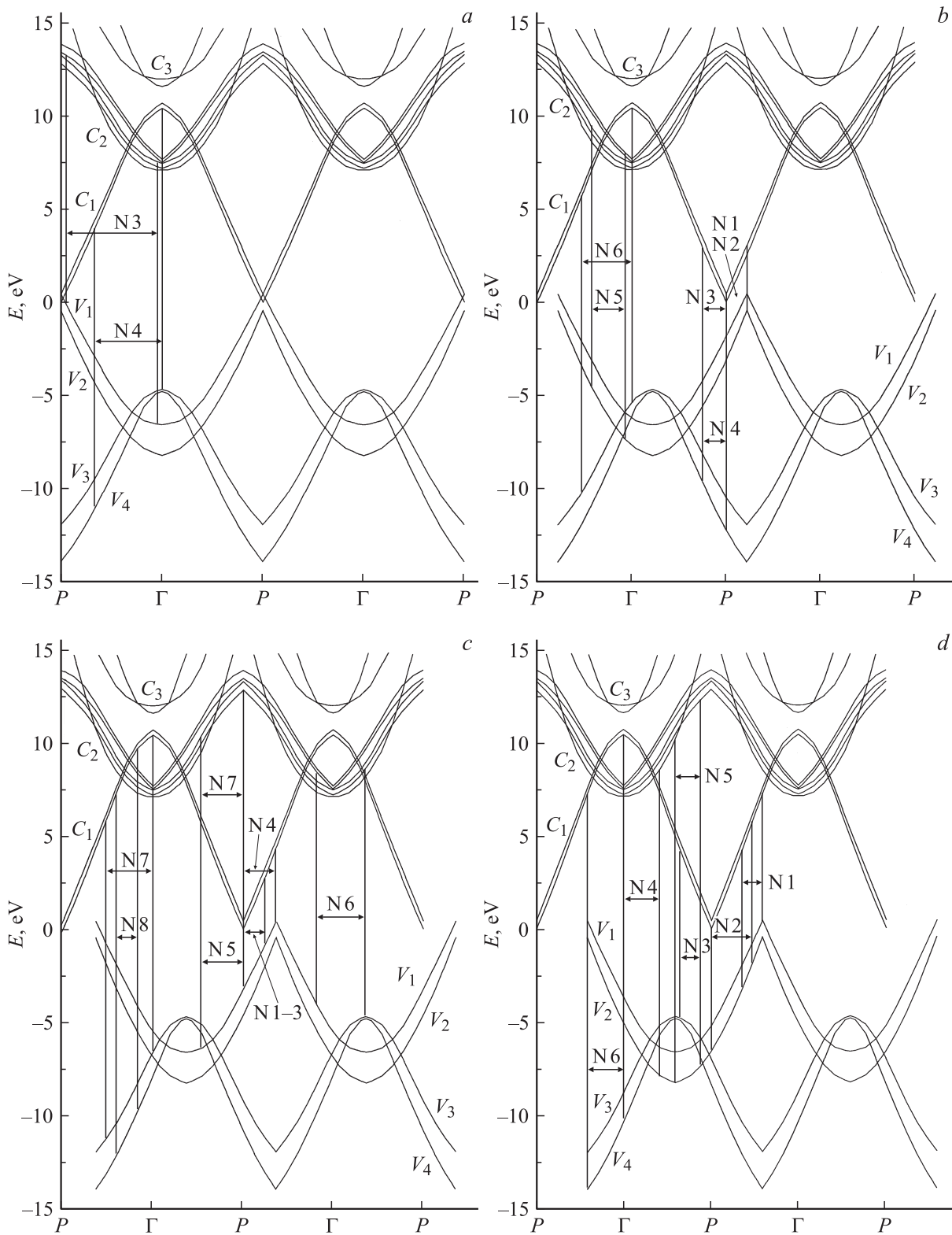


Рис. 2. Схемы зон графита в точках Γ - P для $|\mathbf{q}| = 0$ (a) [13] и смещенных зон на $|\mathbf{q}| = 0.375$ (b), 0.625 (c) и 1.0 \AA^{-1} (d).

электронов заметно отличен от нуля. Установленный эффект открытия квазищели и ее сильного роста с увеличением переданного волнового вектора $|\mathbf{q}|$ быстрых электронов актуален для полуметаллов, узкозон-

ных полупроводников и полупроводников с непрямой запрещенной зоной. Параметры и условия его наличия легко определить, если известны энергетические зоны для рассматриваемых направлений.

В настоящем сообщении впервые получены спектры полных комплексов оптических функций продольных непрямых переходов в области 0–40 эВ для четырех значений переданных волновых векторов $|\mathbf{q}|$ быстрых электронов в точках направления Γ – P зоны Бриллюэна графита. Установлены основные особенности этих спектров. Предложены схемы локализации многих полос переходов на модели смещенных зон. Количественно установлены интенсивные квазинепрямые продольные переходы графита при их возбуждении быстрыми электронами с широким интервалом изменения энергии квазищели в окрестности точки P . Установлено хорошее согласие полученных данных с известными результатами теоретических расчетов и спектров фотоэмиссии для положения нижних зон проводимости и верхних валентных зон графита. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности применения спектров объемных потерь электронов в случае их заметных величин переданных волновых векторов как метода зондирования зон в разных точках выделенных направлений зоны Бриллюэна кристаллов.

Список литературы

- [1] H. Raether. *Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons* (Berlin, Springer, 1980).
- [2] В.В. Соболев, В.В. Немошкаленко. *Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников* (Киев, Наук. думка, 1988).
- [3] K. Zeppenfeld. *Z. Phys.* **243**, 229 (1976).
- [4] U. Buchner. *Phys. Status Solidi B*, **81**, 227 (1977).
- [5] C.H. Chen. *Phys. Status Solidi B*, **83**, 347 (1977).
- [6] J. Fink, G. Leising. *Phys. Rev. B*, **34**, 5320 (1986).
- [7] J. Fink, M. Knupfer, S. Alzkern, M.S. Golden. *J. Electron Spectrosc. Rel. Phen.*, **117–118**, 287 (2001).
- [8] A.G. Marinopoulos, L. Reining, A. Rubio, V. Olevano. *Phys. Rev. B*, **69**, 245 419 (2004).
- [9] В.В. Соболев, А.И. Калугин, В.Вал. Соболев, С.Г. Исхакова. *ФТП*, **42**, 777 (2008).
- [10] В.Вал. Соболев, В.В. Соболев. *Тр. VI Междунар. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники“* (СПб., Изд-во СПб ГПУ, 2008) с. 248.
- [11] В.Вал. Соболев, А.П. Тимонов, В.В. Соболев. *Тр. Междунар. конф. „Физические процессы в неупорядоченных полупроводниковых структурах“* (Ульяновск, УлГУ, 1999) с. 80.
- [12] В.В. Соболев. *Собственные энергетические уровни твердых тел группы A^{IV}* (Кишинев, Штиинца, 1978).
- [13] R.F. Willis, B. Fitton, G.S. Painter. *Phys. Rev. B*, **9**, 1926 (1974).
- [14] R.F. Willis, B. Fenerbacher, B. Fitton. *Phys. Rev. B*, **4**, 2441 (1971).

Редактор Л.В. Беляков

Indirect interband transitions of the graphite with the large energy of the quasigap

V.V. Sobolev, E.A. Antonov, V.Val. Sobolev*

Udmurt State University,
426034 Izhevsk, Russia

* Izhevsk Technical State University,
426069 Izhevsk, Russia

Abstract The fundamental optical function sets for the longitudinal indirect interband transitions in the energy region 0 to 40 eV of the graphite with the quasigap to 2.6 eV were at the first time determined. Their structure and parameters were highly depended on the electron transferred wave vector \mathbf{q} . The nature of their maxima and shoulders is supposed by the model of the theoretical displaced bands for the three electron transferred wave vectors \mathbf{q} in the volume characteristic electron energy losses for the line Γ – P of the Brillouin zone. The calculations were obtained using known experimental spectra of the graphite in the energy range 0 to 40 eV and $|\mathbf{q}| = 0.00, 0.375, 0.625$ and 1.00 \AA^{-1} on the base of the computer programs.