

Роль анизотропии и спин-орбитального взаимодействия в оптических и диэлектрических свойствах соединений BiTeI и BiTeCl

И. П. Русинов^{a,b1)}, О. Е. Терещенко^{b,c,d}, К. А. Кох^{b,d,e}, А. Р. Шахматова^d, И. А. Азаров^{c,d}, Е. В. Чулков^{a,b,f,g}

^a Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

^b С.-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

^c Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^d Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

^e Институт геологии и минералогии им. Соболева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^f Departamento de Fisica de Materiales UPV/EHU, 20080 San Sebastián, Basque Country, Spain

^g Centro de Fisica de Materiales CFM-MPC, Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 10 марта 2015 г.

Теоретически в рамках нестационарной теории функционала электронной плотности, а также экспериментально методом спектральной эллипсометрии исследованы диэлектрические и оптические свойства полупроводниковых соединений BiTeI и BiTeCl . Обнаружены анизотропия диэлектрических констант в длинноволновом пределе и дисперсии объемных плазмонов σ и $\sigma + \pi$ в продольных и поперечном направлениях кристаллов. Показано, что учет спин-орбитального взаимодействия в данных системах является необходимым для получения согласия теории с результатами оптических измерений.

DOI: 10.7868/S0370274X15080019

В последнее время пристальное внимание исследователей привлекает возможность управления спиновой степенью свободы электронов внешним электрическим полем. На данной основе можно создавать устройства спинтроники [1, 2]. Очевидными кандидатами на реализацию таких устройств являются системы, в которых важную роль играет спин-орбитальное взаимодействие (СОВ), связывающее спиновые и орбитальные моменты электронов, в частности теллуругалоиды висмута, поскольку в них наблюдается гигантское спин-орбитальное расщепление электронных состояний [3]. Электронная структура теллуругалоидов висмута как в объеме, так и на поверхности достаточно подробно изучена [3–15]. Для практических применений данных соединений важное значение имеет изучение их оптических и диэлектрических свойств. До настоящего времени такие исследования в основном проводились в низкоэнергетической области электронных переходов до энергий 1–2 эВ [16–21]. Электронные переходы больших энергий малоизучены.

Данное письмо посвящено исследованию оптических и диэлектрических свойств теллуругалоидов

BiTeI и BiTeCl в области оптических переходов вплоть до энергий 30 эВ. В работе теоретически получены три компоненты комплексной диэлектрической функции (ДФ), соответствующие трем направлениям осей координат. На их основе рассчитаны функция потерь (ФП), а также показатели поглощения и преломления (k и n). Показано, что на рассматриваемые величины влияет ряд факторов: выбранное направление в пространстве, эффекты локального поля (ЭЛП), учет спин-орбитального взаимодействия (СОВ), выбор обменно-корреляционного функционала (ОКФ).

Во всем диапазоне энергий были обнаружены значительные отличия между продольными (a^* , b^*) и поперечной (c^*) компонентами ДФ. Вне зависимости от направления значительный вклад в ДФ связан с ЭЛП, что объясняется неоднородностью электронного газа вследствие слоистого характера кристаллической структуры BiTeI и BiTeCl . В области до 5 эВ важное значение имеет учет СОВ, что связано с вкладом в электронный спектр вблизи запрещенной щели релятивистских эффектов. Кроме того, в диапазоне энергий до 1.5 эВ существует зависимость от выбора ОКФ. Все указанные факторы сказываются на получаемых диэлектрических констан-

¹⁾ e-mail: rusinovip@gmail.com