

# СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $FeIn_2S_4$ В ДАЛЬНОЙ ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ

Павлюковец С.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Беларусь  
E-mail: s.pauliukavets@gmail.com

**Аннотация** — Исследованы ИК спектры отражения монокристаллов  $FeIn_2S_4$  в области частот (500 ... 50)  $cm^{-1}$ . Определены параметры фононов и диэлектрические постоянные. Рассчитаны эффективные заряды.

## 1. Введение

Фононный спектр является фундаментальной характеристикой кристалла, которая определяет термодинамические свойства материала, кинетические свойства носителей заряда и оптические свойства в инфракрасной области.

Цель данной работы — исследование спектров отражения  $FeIn_2S_4$  в дальней инфракрасной области.

## 2. Основная часть

Монокристаллы  $FeIn_2S_4$  получены прямым сплавлением элементов высокой степени чистоты методом Бриджмена-Стокбаргера [1]. Спектры ИК отражения измерены на Фурье-спектрометре *FIR-30* в области частот (500 ... 50)  $cm^{-1}$  при комнатной температуре с разрешением (2 ... 4)  $cm^{-1}$ .

Тройное соединение  $FeIn_2S_4$  кристаллизуется в структуре шпинели, относящейся к пространственной группе  $Fd\bar{3}m$ . Примитивная ячейка структуры шпинели содержит 14 атомов. Атомы железа имеют тетраэдрическую координацию симметрии  $T_d$ , окружены четырьмя атомами серы. Атомы индия, в свою очередь, находятся в тетраэдрах и октаэдрах. В октаэдрах они имеют симметрию  $D_{3d}$  и окружены шестью атомами серы. Атомы серы плотно упакованы и образуют связи симметрии  $S_{3v}$ . Общее число колебательных мод в центре зоны Бриллюэна для кристаллической решетки шпинели равно 42 [2]:

$$\Gamma = A_{1g} + E_g + F_{1g} + 3F_{2g} + 2A_{2u} + 2E_u + 5F_{1u} + 2F_{2u}.$$

В соответствии с правилами отбора, ИК активными являются моды симметрии  $F_{1u}$ . Из пяти активных мод четыре оптические и одна акустическая. В спектрах КРС активными являются моды симметрии  $A_{1g}$ ,  $E_g$  и  $F_{2g}$ . Все остальные моды являются неактивными как в ИК, так и КРС спектрах.

На рис. 1 представлены ИК спектры отражения монокристаллов  $FeIn_2S_4$ .

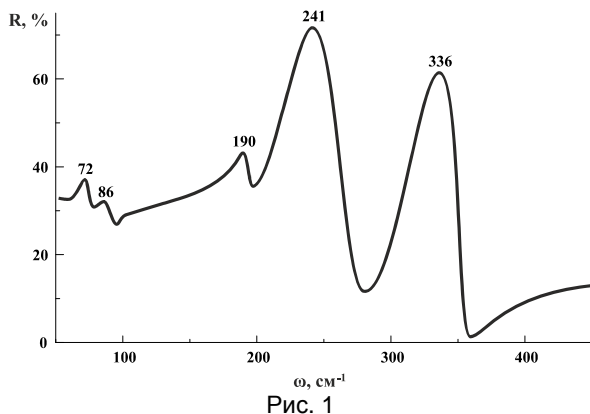


Рис. 1

Видно, что в спектрах указанного соединения, в исследуемой области частот четко проявляются пять полос отражения при (72, 86, 190, 241 и 336)  $cm^{-1}$ .

Снятые спектры отражения обрабатывали методом последовательного дисперсионного анализа Крамерса-Кронига. С помощью этого метода определены значения частот продольных  $\omega_{LO}$  и поперечных  $\omega_{TO}$  фононов, коэффициенты затухания  $g_n$  и интенсивность  $S_n$ . Параметры, давшие наилучшее совпадение приведены в таблице 1.

Таблица 1

№ моды	$\omega_{LO}$ , $cm^{-1}$	$\omega_{TO}$ , $cm^{-1}$	$g_n$	$S_n$
1	351	316	17,5	0,12
2	262	225	18,5	0,18
3	194	184	5	0,06
4	91	83	4	0,11
5	76	68	4	0,13

Используя результаты расчетов ИК отражения, определены относительный эффективный ионный заряд, заряды Борна и Сигети [3]. Их значения представлены в таблице 2.

Таблица 2

$\epsilon_\infty$	$\epsilon_0$	$\frac{e_s^*}{Z_{эфф} e}$	$\frac{e_s^*}{Z_e}$	$\frac{e_B^*}{Z_e}$
6,8	14,6	0,77	0,89	-2,61

Полученные результаты свидетельствуют о том, что в спектрах ИК отражения выявлены все колебательные моды, которые вносят основной вклад в  $\epsilon_\infty$ , а также определены эффективные заряды, характеризующие диэлектрические свойства  $FeIn_2S_4$ .

## 3. Заключение

На выращенных монокристаллах  $FeIn_2S_4$  проведены исследования спектров отражения в дальней инфракрасной области. Определены основные оптические параметры и рассчитаны эффективный ионный заряд, заряды Сигети и Борна.

## 4. Список литературы

- [1] Боднар И.В. Выращивание монокристаллов  $FeIn_2S_4$  и создание фоточувствительных структур на их основе / И.В. Боднар, С.А. Павлюковец, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь // ФТП. — 2009. — Т.43, №11. — С. 1553 — 1556.
- [2] Kushwaha A.K. Zone-centre phonon frequencies for inverse spinel structure compounds / A.K. Kushwaha // Indian J. Pure Appl. Phys. — 2008. — Vol. 46. — P. 788 — 790.
- [3] Kushwaha A.K. Effective charges in ternary chalcogenide spinels / A.K. Kushwaha, S.S. Kushwaha // Indian J. Pure Appl. Phys. — 2005. — Vol. 43. — P. 664 — 667

## FAR-INFRARED REFLECTION SPECTRA OF $FeIn_2S_4$ SINGLE CRYSTALS

Pauliukavets S.A.

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Belarus

**Abstract** — The IR reflection spectra of the  $FeIn_2S_4$  single crystals are investigated at the range of (400...50)  $cm^{-1}$ . Parameters of phonons and dielectric constants are defined. Effective charges are calculated.