

УДК 621.315 : 535.215

PACS 31.15.A, 31.15.ae, 71.15.Mb, 71.20.-b, 74.20.Pq, 73.21.Cd, 78.20.Ci

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.54-61

К.Є. Глухов¹, Л.Ю. Хархаліс¹, Т.Я. Бабука^{1,2}

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

² Інститут фізики, Університет ім. Яна Дуглоша в Ченстохові, ал. Армії Крайовей, 13/15, 42200 Ченстохова, Польща;

e-mail: lkharkhalis@gmail.com

AB INITIO ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК АНТИФЕРОМАГНЕТИКА FePS₃

У даній роботі проведено дослідження електронних та оптичних властивостей шаруватого кристалу FePS₃. Вперше розраховано енергетичний зонний спектр та парціальні густини станів з використанням *ab initio* підходу. Базуючись на розрахунках зонної структури, одержано енергетичні залежності для оптичних характеристик, а саме дійсна і уявна частина діелектричної проникливості та показник заломлення і показник поглинання кристала FePS₃.

Ключові слова: Електронна зонна структура; Парціальні густини станів; Оптичні коефіцієнти

Вступ

Серед великої кількості сполук з аніонним комплексом [P₂Se₆]⁴⁻ значний інтерес представляють кристали типу MPS₃ (M = Fe, Mn, Co). Дані матеріали є парамагнетиками при кімнатній температурі і антиферомагнетиками при низьких температурах. Завдяки незвичайним електричним, оптичним і магнітним властивостям в останній час вони широко застосовуються в якості нелінійних оптичних, магнітних, фотомагнітних і катодних матеріалів [1,2]. Також дані кристали характеризуються слабким міжшаровим ван дер Ваальсівським зв'язком, що дозволяє інтеркалювати їх різними лужними металами. Це відкриває можливість їх використання як електроактивних елементів у літєвих комірках [3].

Фізичні властивості чистого та інтеркальованого кристалів FePS₃ були вивчені раніше авторами робіт [4-7]. Електронні спектри для даного матеріалу та споріднених з ним сполук MPS₃ (M = Mn, Ni) представлені в роботі [8]. Авторами [6, 9-11] проводились експериментальні дослідження фотоemisійних спектрів, спектрів відбивання і поглинання та спектрів

комбінаційного розсіювання для об'ємного кристалу FePS₃ і шарів на його основі [12,13]. 2D-матеріали типу MPS₃ (M = Fe, Mn, Ni, Cd, Zn) і MPSe₃ (M = Fe, Mn) викликають підвищений інтерес завдяки новим електронним, механічним і фотокаталітичним властивостям та перспективам їх використання в фотокаталізі [14].

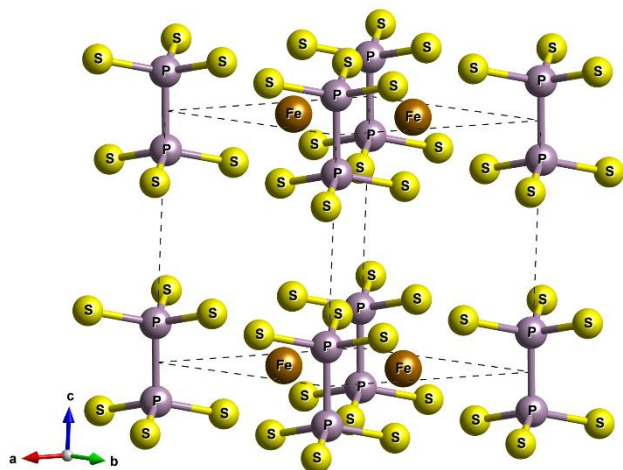
Метою даної роботи є детальний аналіз електронних і оптичних властивостей антиферомагнетика FePS₃, одержаних квантово-механічними розрахунками із перших принципів.

Особливості кристалічної структури антиферомагнетика FePS₃

Згідно рентгеноструктурних досліджень [15, 16] FePS₃ кристалізується в моноклінній сингонії і описується просторовою групою C2/m. Параметри ґратки рівні $a = 5.946 \text{ \AA}$, $b = 10.300 \text{ \AA}$, $c = 6.7222 \text{ \AA}$, і $\beta = 107.16^\circ$. Координати атомів приведені в таблиці 1. Елементарна комірка (рис.1) містить 20 атомів, які утворюють перпендикулярно до напрямку Oz два відокремлені шари, між якими наявний слабкий ван дер Ваальсовий зв'язок.

Таблиця 1. Координати атомів в комірці FePS₃

Атом	x	y	z	Позиція Викоффа
Fe	0.0000	0.3326	0.0000	4g
P1	0.0566	0.0000	0.1692	4i
S1	0.7501	0.0000	0.2470	4i
S2	0.2488	0.1655	0.2485	8j

Рис.1. Елементарна комірця FePS₃

Зонний спектр та парціальні густини станів

Розрахунки електронного спектру шаруватого кристалу FePS₃ проведено в *ab initio* підході при використанні теорії функціонала електронної густини, реалізовану у пакеті ABINIT [17]. Обмінно-кореляційна взаємодія враховувалася у лінійному наближенні (LDA) [18,19], псевдопотенціали атомів вибиралися у параметризації Хорвігзена-Гоедекера-Хаттера [20]. Електронні конфігурації атомів заліза, фосфору та сірки були наступні: Fe – 3d⁶4s², P – 3s²3p³, S – 3s²3p⁴.

База плоских хвиль, що використовувалися для розкладу псевдохвильових функцій, була обмежена енергією відсічки 720 еВ. Інтегрування по зоні Бріллюена здійснювалося методом тетрадрів, побудованих по сітці особливих точок, обраних за алгоритмом Монхорста-Пака [21] зі щільністю 3x3x2. Також були враховані спінові ступені вільності електронів.

Обчислення повної енергії для різних спінових конфігурацій свідчить про те, що кристал FePS₃ є антиферромагнетиком.

На рис. 3 приведена зонна структура та парціальні густини s , p і d -станів для FePS₃. Валентна зона складається з 62 підзон. Максимум валентної зони зосереджений в т. Γ , а мінімум зони провідності – в напрямку $M-A$ зони Бріллюена (рис.2). Ширина непрямой забороненої зони згідно наших розрахунків складає $E_g^{\text{calc}}=0.985$ еВ ($E_g^{\text{exp}}\sim 1.59$ еВ [4], $E_g^{\text{exp}}\sim 1.3$ еВ [12]). Краї валентної зони та зони провідності в основному формуються, як впливає з рис.3 (а,б,в), p -орбіталями фосфору і сірки, та d -орбіталями заліза. s -орбітали атомів P і S вносять суттєвий вклад в низькоенергетичну частину валентної зони в області енергій $-18 \div -12$ еВ.

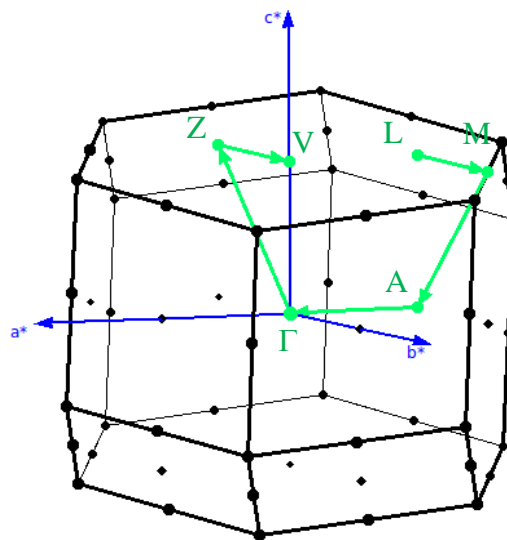


Рис.2. Зона Бріллюена та координати високосиметричних точок вздовж контуру обходу $L(-\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $M(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $A(-\frac{1}{2}, 0, 0)$, $\Gamma(0, 0, 0)$, $Z(0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $V(0, 0, \frac{1}{2})$

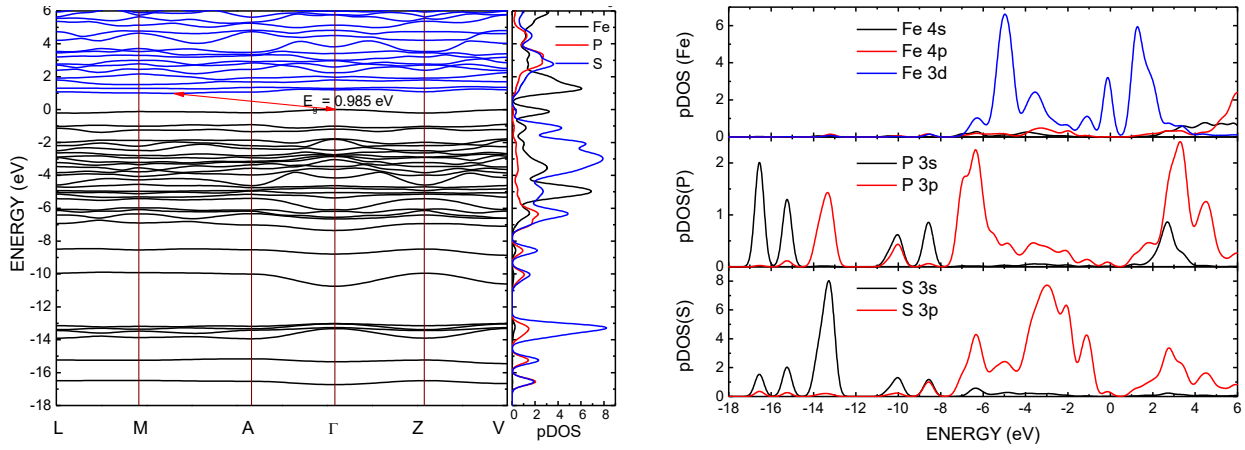


Рис.2 Зонна структура та парціальні густини станів для FePS₃

Оптичні властивості FePS₃

З розрахованої зонної структури для кристалу FePS₃ нами одержано енергетичні залежності для реальної та уявної частин діелектричної проникливості, та, відповідно, енергетичні залежності для показника заломлення і показника поглинання для різних поляризацій світла.

$$\varepsilon_2(\vec{q} \rightarrow 0, \hbar\omega) = \frac{4e^2\pi}{m^2\omega} \int d^3\vec{k} \sum_{n,n'} \left| \langle \vec{k}n | \vec{P} | \vec{k}n' \rangle \right|^2 f_{\vec{k}n} (1 - f_{\vec{k}n'}) \delta(E_{\vec{k}n} - E_{\vec{k}n'} - \hbar\omega) \quad (2)$$

а $\varepsilon_1(\omega)$ за допомогою співвідношення Крамерса-Кроніга [24]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

Оптичні константи, які використовуються при феноменологічному описі оптичних властивостей, зв'язані між собою рівняннями

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad \varepsilon_2 = 2nk, \quad (3)$$

де n показник заломлення, а k – показник поглинання.

Для розрахунку $\varepsilon_2(\omega)$, який включає дипольні матричні елементи, вибиралось 30 k -точок в зоні Бріллюена.

Одержані нами оптичні спектри приведені на рис.3 а, б. Слід відмітити, що енергетичні залежності для $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$, $n(\omega)$ і $k(\omega)$ для поляризацій світла $E \parallel x$ і $E \parallel y$

Як відомо, комплексна діелектрична функція, яка відображає лінійний відклик системи на зовнішнє електромагнітне поле, має вигляд:

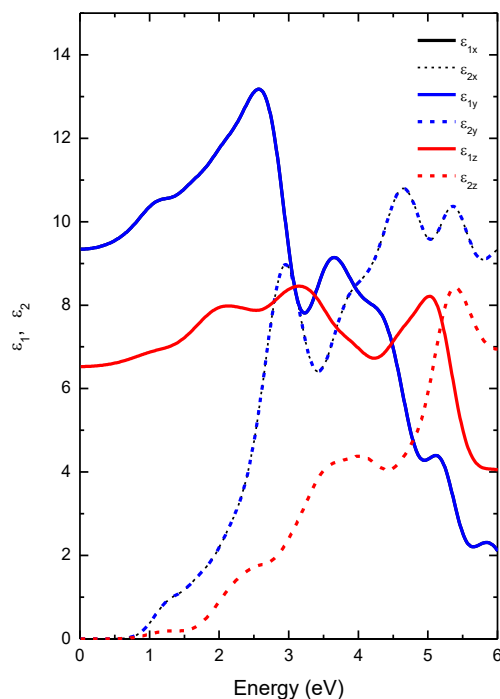
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

де $\varepsilon_2(\omega)$ визначається з перших принципів [22,23]:

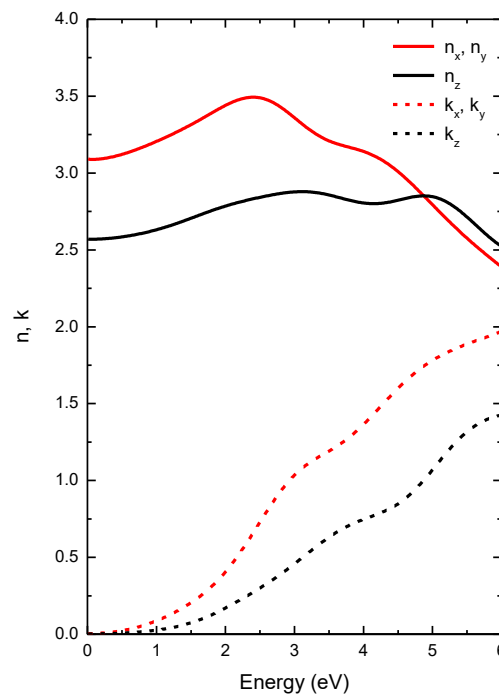
вздовж x і y напрямків повністю співпадають, що пов'язується з симетрією кристалу FePS₃. При енергії $E=0$ $n_x=n_y=3.1$, а $n_z=2.51$ ($n_{\text{exp}} \sim 2.49$ [6]). Максимальний для показника заломлення пік ($n_{x,y} \sim 3.5$) для випадків $E \parallel x$ і $E \parallel y$ і для $E \parallel z$ ($n_{zz} \sim 2.75$) спостерігається в області енергій $E \sim 2.5$ еВ, що відповідає ближній інфрачервоній області спектру. Основною особливістю для даного параметра, як видно з рис.3 б, є виявлена анізотропія ($n_{x,y}/n_z = 1.27$). Цікаво відмітити, що в області енергій $E \sim 5$ еВ має місце інверсія анізотропії для даного оптичного параметра та її зменшення при $E > 5$ еВ ($n_z/n_{x,y} = 1.1$). Подібна анізотропна тенденція зберігається і для дійсної частини діелектричної проникливості. Найбільше значення є для $\varepsilon_{1x,y}(\omega) \sim 13$ при $E \sim 2.2$ еВ і $\varepsilon_{1z}(\omega) \sim 8.2$ при $E \sim 3.2$ еВ. Для енергії $E=0$ ці параметри рівні $\varepsilon_{1x,y} \sim 9.3$ і $\varepsilon_{1z} \sim 6.5$.

Як видно з рис.3.а, енергетична залежність для уявної частини діелектричної проникливості характеризується наявністю

декількох піків в області $2.5 \div 6$ еВ. Для поляризацій світла в x і y напрямках найбільш інтенсивні піки мають місце при 2.8; 4.5 і 5.5 еВ, а для z -напрямку наявні більш пологі піки при 2.5, 4, 5.5 еВ, що корелює з даними авторів [6, 8].



а)



б)

Рис.4. Енергетичні залежності для оптичних характеристик: а) дійсної і уявної частин діелектричної проникливості; б) показника заломлення і показника поглинання.

Висновки

У даній роботі представлені результати першопринципних розрахунків в теорії функціоналу густини електронної структури та оптичних властивостей для антиферомагнетика FePS_3 . Проаналізовано

електронний зонний спектр, парціальні густини станів, енергетичні залежності для показника заломлення і коефіцієнта поглинання. Виявлена суттєва анізотропія в оптичних константах для різних областей енергії та кореляція з експериментальними даними.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Ismail N., El-Meligi A.A., Temerk Y.M., Badr M.A., Madian M. Synthesis and characterization of MnPS_3 for hydrogen sorption// J. of Solid State Chem.- 2010.- V. 183.- P. 984.
2. El-Meligi A.A., Madian M., Ismail N. Fabrication and Characterization Single Crystal of FePS_3 Layered Material//International Advanced Research Journal in Science, Engineering and Technology.- 2015.- V. 2- No. 12.- P. 117-120.
3. Kuzminskii Y.V., Voronin B.M., Redin N.N. Iron and nickel phosphorus trisulfides as electroactive materials for primary lithium batteries// J. of Power Sources 1995. - V. 55(2). - P. 133-141.
4. Foot P.J.S., Suradi J., Lee P.A. Optical and electronic properties of the layered

- semiconductors NiPS₃ and FePS₃// *Mat. Res. Bull.*- 1980.- V. 15.- P. 189-193.
5. Barj M., Sourisseau C., Ouvrard G., Brec R. Infrared studies of lithium intercalation in the FePS₃ and NiPS₃ layer-type compounds//*Solid State Ionics.*- 1983.- V. 11.- No.2.- P. 179-183.
 6. Piacentini M., Grasso V., Santangelo S., Fanfoni M., Modesti S., Savoia A. (Soft x-ray absorption of FePS₃ and NiPS₃//*Solid State Communications.*- 1984.- V. 51.- No. 7.- P. 467-472.
 7. Kristie J.K., Cui Y. The new skinny in two-dimensional nanomaterials// *ACS NANO* (in press).
 8. Kurita N., Nakao K. Band Structures and physical properties of magnetic layered semiconductors FePS₃// *Journ. of the Physical Society of Japan.*- 1989.- V.58.- No2.- P.610-621.
 9. Cleary D.A., Francis A.H. Analysis of the Mid-IR Electronic Absorption Spectra of Fe₂P₂S₆ and Co₂P₂S₆// *J. Phys. Chem.*- 1988. - V. 92.- P. 2415-2419.
 10. Piacentini M., Khumalo F.S., Leveque G., Olson C.G., Lynch D.W. X-ray photoemission and optical spectra of NiPS₃, FePS₃ and ZnPS₃// *Chemical Physics.*- 1982.- V. 72.- P. 61-71.
 11. Khumalo F.S., Hughes H.P. Reflectance spectra of some FePS₃-type layer compounds in the vacuum ultraviolet//*Phys. Rev. B.*- 1981.- V. 23.- P. 5375-5383.
 12. Du K.-Z., Wang X.-Z., Liu Y., Hu P., Utama M. I. B.C., Gan K., Xiong Q., Kloc C. Weak van der Waal stacking , wide-range band gap and Raman study on ultrathin layers of metal phosphorous trichalcogenides//*ACS Nano.*- 2016.- V. 10.- P. 1738- 1757.
 13. Wang X., Du K., Yang Yu., Liu F., Hu P. et.al. Raman spectroscopy of atomically thin two-dimensional magnetic iron phosphorus trisulfide (FePS₃) crystals// *2D Mater.*- 2016. -V. 3.- P. 031009-1 - 031009-9.
 14. Zhang, X., Zhao, X.D, Wu, D.H, Jing, Y., Zhou, Z. MnPSe₃ Monolayer: A Promising 2D Visible-Light Photohydrolytic Catalyst with High Carrier Mobility// *Advanced Science.*- 2016.- V. 3.- P. 1600062-1- 1600062-5.
 15. Clement R., Lomas L., Audiere J.P. Intercalation chemistry of layered iron trithiohypophosphate (FePS₃). An approach toward insulating magnets below 90 K// *Chem. Mater.*- 1990.- V. 2.- No. 6.- P. 641-643.
 16. Joy P.A., Vasudevan S. Magnetism in the layered transition-metal thiophosphates MPS₃ (M=Mn, Fe, and Ni)// *J. Am. Chem. Soc.* -1992.- V. 114.-P. 7792.
 17. Gonze X., Beuken J.M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G.M., Sindic L., Verstraete G., Zerah G., Jollet F., Torrent M., Roy A., Mikami M., Ghosez Ph., Raty J.-Y., Allan D.C. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project// *Comput. Mater. Sci.* - 2002.- V. 25.- P. 478.
 18. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas// *Phys. Rev.*, 1964.- V. 136.- No. 3.- P. B864–B871.
 19. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects// *Phys. Rev.*, 1965. - V. 140. - No. 4. -P. A1133–A1138.
 20. Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J. Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn// *Phys. Rev. B.*- 1998.- V. 58.- P. 3641–3662.
 21. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations// *Phys. Rev. B.*- 1976.- V. 13. No. 12.- P. 5188–5192.
 22. Read A. J., Needs R. J. Calculation of optical matrix elements with nonlocal pseudopotentials.- *Phys. Rev. B.*- 1991.- V. 44.- P. 13071-13073.
 23. Palik E. D. Handbook of optical constants of solids. – Orlando: Academic Press, 1985.
 24. Бассани, Ф., Пастори Парравичини, Дж. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. – Москва: Наука, 1982. – 388 с.

Стаття надійшла до редакції 29.11.2017

К.Е. Глухов¹, Л.Ю. Хархалис¹, Т.Я. Бабука^{1,2}

¹Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54;

² Институт физики, Университет им. Яна Длугоша в Ченстохове, ал. Армии Крайовой, 13/15, 42200 Ченстохова, Польша

***AB INITIO* ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА FePS₃**

В данной работе проведено исследование электронных и оптических свойств слоистого кристалла FePS₃. Впервые рассчитаны энергетический зонный спектр и парциальные плотности состояний с использованием *ab initio* подходов. Основываясь на расчётах зонной структуры, получены энергетические зависимости оптических характеристик, а именно, действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости, показатель преломления и показатель поглощения кристалла FePS₃.

Ключевые слова: Электронная зонная структура; Парциальные плотности состояний; Оптические коэффициенты

PACS 31.15.A, 31.15.ae, 71.15.Mb, 71.20.-b, 74.20.Pq, 73.21.Cd, 78.20.Ci
DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.54-61

К.Е. Glukhov¹, L.Yu. Kharkhalis¹, Т.Я. Babuka^{1,2}

¹Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

²Institute of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Science, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Al. Armii Krajowej 13/15, 42-200 Czestochowa, Poland

***AB INITIO* INVESTIGATIONS OF THE OPTICAL CHARACTERISTICS OF FePS₃ ANTIFERROMAGNETIC**

Introduction. Layered thiophosphates FePS₃ is the van-der-Waals crystal with interesting physical and chemical properties. In particular, its layered structure gives a clear pathway to obtain the 2D material by exfoliation method. Exhibiting high structural anisotropy, the mentioned material can be intercalated by alkali metal ions without any significant distortion of lattice parameters, making it promising candidate for the creation of low-cost cathodes for high-energy-density batteries. An electronic band-structure model for FePS₃ crystal is needed for both academic and technological reason.

Purpose. The main aim of our paper is to carry out a complete DFT-based search to investigate of the electronic and optical properties for the antiferromagnetic compound FePS₃.

Methods. Quantum chemical calculations in this work were performed in the framework of density functional theory (DFT) within local approximation for exchange-correlation interaction (LDA) and dispersion correction (DFT-D) methodology. Optical properties obtained from calculated ϵ_1 and ϵ_2 energy dependencies.

Results. In the results of our work, the electronic and optical properties of FePS₃ crystal were investigated. In addition, the energy band spectra and partial density of state for the antiferromagnetic phase of FePS₃ crystal were calculated. Also, the real and imaginary part of dielectric insensitivity, refractive index and absorption index from first principle calculations were obtained.

Conclusion. For the first time we carried out the investigations of the optical characteristics for the FePS₃ layered antiferromagnetic on the basis of the electronic band spectrum calculation. The detail analysis of the optical spectra and the evaluations of the refractive index and dielectric constants shows the essential anisotropy in the different energy ranges. Our results for electronic and optical properties are compared with the experimental and other theoretical results.

Keywords: Electronic band structure, partial density of state, optical characteristics

REFERENCES

- Ismail N., El-Meligi A.A., Temerk Y.M., Badr M.A., Madian M. (2010), "Synthesis and characterization of MnPS₃ for hydrogen sorption", *J. of Solid State Chem.*, V. 183, p. 984.
- El-Meligi A.A., Madian M., Ismail N. (2015), "Fabrication and Characterization Single Crystal of FePS₃ Layered Material", *International Advanced Research Journal in Science, Engineering and Technology*, V. 2, No.12, pp. 117-120.
- Kuzminskii Y.V., Voronin B.M., Redin N.N. (1995), "Iron and nickel phosphorus trisulfides as electroactive materials for primary lithium batteries", *J. of Power Sources*, V. 55(2), pp. 133-141.
- Foot P.J.S., Suradi J., Lee P.A. (1980), "Optical and electronic properties of the layered semiconductors NiPS₃ and FePS₃", *Mat. Res. Bull.*, V. 15, pp. 189-193.
- Barj M., Sourisseau C., Ouvrard G., Brec R. (1983), "Infrared studies of lithium intercalation in the FePS₃ and NiPS₃ layer-type compounds", *Solid State Ionics*, V. 11, No. 2, pp. 179-183.
- Piacentini M., Grasso V., Santangelo S., Fanfoni M., Modesti S., Savoia A. (1984), "Soft x-ray absorption of FePS₃ and NiPS₃", *Solid State Communications*, V. 51, No.7, pp. 467-472.
- Kristie J.K., Cui Y., "The new skinny in two-dimensional nanomaterials", *ACS NANO* (in press).
- Kurita N., Nakao K. (1989), "Band Structures and physical properties of magnetic layered semiconductors FePS₃", *Journ. of the Physical Society of Japan*, V. 58, No. 2, pp. 610-621.
- Cleary D.A., Francis A.H. (1988), "Analysis of the Mid-IR Electronic Absorption Spectra of Fe₂P₂S₆ and Co₂P₂S₆", *J. Phys. Chem.*, V. 92, pp. 2415-2419.
- Piacentini M., Khumalo F.S., Leveque G., Olson C.G., Lynch D.W. (1982), "X-ray photoemission and optical spectra of NiPS₃, FePS₃ and ZnPS₃", *Chemical Physics*, V. 72, pp. 61-71.
- Khumalo F.S., Hughes H.P. (1981), "Reflectance spectra of some FePS₃-type layer compounds in the vacuum ultraviolet", *Phys. Rev. B*, V. 23, pp. 5375-5383
- Du K.-Z., Wang X.-Z., Liu Y., Hu P., Utama M. I. B.C., Gan K., Xiong Q., Kloc C. (2016), "Weak van der Waal stacking, wide-range band gap and Raman study on ultrathin layers of metal phosphorous trichalcogenides", *ACS Nano*, V. 10, pp. 1738- 1757.
- Wang X., Du K., Yang Yu, Liu F., Hu P. et.al. (2106), "Raman spectroscopy of atomically thin two-dimensional magnetic iron phosphorus trisulfide (FePS₃) crystals", *2D Mater.*, V. 3, pp. 031009-1 - 031009-9.
- Zhang X., Zhao X. D, Wu D. H, Jing Y., Zhou Z. (2016), "MnPSe₃ Monolayer: A Promising 2D Visible-Light Photohydrolytic Catalyst with High Carrier Mobility", *Advanced Science*, V. 3, pp. 1600062-1-1600062-5.
- Clement R., Lomas L., Audiere J. P. (1990), "Intercalation chemistry of layered iron trithiohypophosphate (FePS₃). An approach toward insulating magnets below 90 K", *Chem. Mater.*, V. 2, 6, pp. 641-643.
- Joy P.A., Vasudevan S. (1992), "Magnetism in the layered transition-metal thiophosphates MPS₃ (M=Mn, Fe, and Ni)" *J. Am. Chem. Soc.*, V. 114, p. 7792.
- Gonze X., Beuken J.M., Caracas R., Detraux F., Fuchs M., Rignanese G.M., Sindic L., Verstraete G., Zerah G., Jollet F., Torent M., Roy A., Mikami M., Ghosez Ph., Raty J.-Y., Allan D.C. (2002), "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project" *Comput. Mater. Sci.*, V. 25, p. 478.
- Hohenberg P., Kohn W. (1964), "Inhomogeneous Electron Gas", *Phys. Rev.*, V. 136, No.3. pp. B864–B871.
- Kohn W., Sham L.J. (1965), "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", *Phys. Rev.*, V. 140, No.4. pp. A1133–A1138.
- Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J. (1998), "Relativistic separable dual-space

- Gaussian pseudopotentials from H to Rn”, Phys. Rev. B, V. 58, pp. 3641–3662.
21. Monkhorst H.J., Pack J.D. (1976), “Special points for Brillouin-zone integrations”, Phys. Rev. B., V. 13, No.12, pp. 5188–5192.
 22. Read A. J., Needs R. J. (1991), "Calculation of optical matrix elements with non-local pseudopotentials", Phys. Rev. B, V. 44, pp. 13071-13073.
 23. Palik, E. D., Handbook of optical constants of solids. – Orlando: Academic Press, 1985.
 24. Bassani, F., Pastori Parraichini, Dzh. (1982), „Electronic states and optical transitions in solids” [„Electronnie sostojanija I opticheskiye perekhody v terdykh telakh”], Moskva.: Nauka, Moscow, 388 p.

© Ужгородський національний університет