



Doctoral Thesis

Optical properties and electronic structure of some rare earth monopnictides

Author(s):

Schlegel, Arnold Walter

Publication Date:

1979

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000211388> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

OPTICAL PROPERTIES AND
ELECTRONIC STRUCTURE OF SOME
RARE EARTH MONOPnictIDES

ABHANDLUNG

zur Erlangung

des Titels eines Doktors der Naturwissenschaften

der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE ZÜRICH

vorgelegt von

SCHLEGEL ARNOLD WALTER

Dipl. Phys. ETH Zürich

geboren am 24. Oktober 1946

von Zürich

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. P. Wachter, Referent

Prof. Dr. H.C. Siegmann, Koreferent

Kurzfassung

Die Reflektivität unter senkrechtem Einfall auf Einkristalle einiger ausgewählten Seltenen Erd - Monopniktide ist bei Zimmertemperatur für Photonenergien zwischen 0.03 eV und 12.5 eV gemessen worden. Die optischen Konstanten wurden durch eine Kramers-Kronig - Transformation des Reflektivitätsspektrums bestimmt.

Die optischen Spektren der Seltenen Erd - Monopniktide enthalten Beiträge sowohl von Intraband - Uebergängen der Leitungselektronen wie auch von Interband - Uebergängen der Valenzelektronen. Die Intraband - Uebergänge wurden mit Hilfe der Drude'schen Theorie für freie Ladungsträger untersucht. So konnte die effektive Elektronenkonzentration dieser Verbindungen hergeleitet werden. Die Strukturen ihrer Interband - Uebergänge konnten miteinander in Beziehung gebracht und an Hand zweier theoretischer Bandstrukturen von isoelektronischen Scandiumpniktiden identifiziert werden.

Die Seltenen Erd - Phosphide weisen in ihrer elektronischen Struktur kaum Unterschiede auf. Sie sind Halbmetalle da das 3p - Band des Phosphors mit dem 5d - Band der Seltenen Erden um etwa ein halbes eV indirekt überlappt. Ihre effektive Ladungsträgerkonzentration liegt bei etwa 0.1 Elektron pro Ion.

Jedoch zeigt sich bei den Seltenen Erd - Nitriden, die abgesehen von CeN auch Halbmetalle sind, eine leichte Abhängigkeit des 5d - Bandes vom Seltenen Erd - Kation. Durchläuft man die Nitride von LaN bis zu YbN, nimmt die Überlappung des 2p - Bandes des Stickstoffs mit dem 5d - Band der Seltenen Erden wegen der abnehmenden 5d - Bandbreite ab. So nimmt auch die effektive Ladungsträgerkonzentration, die für LaN fast 0.2 Elektronen pro Ion ausmacht, in Richtung von LaN zu YbN ab und beträgt bei YbN noch 0.002 Elektronen pro Ion.

Abstract

The normal incidence reflectivity of some rare earth mononictide single crystals has been measured at room temperature in the photon energy range between 0.03 eV and 12.5 eV. The optical constants have been determined by means of the Kramers-Kronig relations.

Both, intraband transitions of conduction electrons and interband transitions of the valence electrons contribute to the spectra of the rare earth mononictides. The intraband transitions have been analysed applying the Drude dielectric response function for free carriers. Thus, the effective electron concentration of these compounds could be deduced. Their interband transition structures have been compared among themselves and related with the theoretical energy band structure of some isoelectronic scandium mononictides.

There are no remarkable differences in the electronic structure among the phosphides. They turned out to be semimetals due to an indirect overlap of the phosphorus 3p - band with the rare earth 5d - band of about half an eV. Their effective conduction electron concentration lies near 0.1 electron per ion.

In contrast to that, the 5d - band of the nitrides being also semimetals, depends on the actual rare earth cation. The nitrides - with the exception of CeN - show a decreasing overlap of the nitrogen 2p - band with the rare earth 5d - band going from LaN to YbN due to a decrease of the d - bandwidth. So, the effective conduction electron concentration being almost 0.2 electrons per ion for LaN, decreases going through the nitrides and reaches YbN with a value of 0.002 electrons per ion.