

УДК 538.958

В. Вал. Соболев, д-р физ.-мат. наук, доц.,
декан ф-та «Математика и естественные науки»
E-mail: Soboleff.val@yandex.ru

Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

Сопоставление оптических спектров германида магния и германия

В работе определены спектры шестнадцати фундаментальных оптических функций Mg_2Ge в области 0–11 эВ при 77 °К. Установлены их основные особенности и общие закономерности. Они содержат шесть максимумов и ступенек, обусловленных междузонными переходами и метастабильными экситонами. Расчеты выполнены на основе известного экспериментального спектра отражения в области 0–11 эВ при 77 °К с помощью компьютерных программ, созданных на основе соотношений Крамерса – Кронига и известных аналитических формул связи между оптическими функциями. Сопоставлены спектры оптических функций Mg_2Ge и кристаллического германия, установлены их существенные структурные различия в широкой области энергии.

Ключевые слова: германид магния, германий, оптическая функция, максимум, ступенька, междузонный переход, экситон, диэлектрическая проницаемость, соотношения Крамерса – Кронига, объемные и поверхностные потери энергии.

Введение

Полупроводниковое соединение Mg_2Ge относится к группе перспективных и представляющих практический интерес для современной твердотельной электроники. Это объясняется его высокой термостабильностью, стойкостью к окислительным и агрессивным средам. Германид магния и его твердые растворы с другими соединениями группы Mg_2X ($X - Si, Ge, Sn$) используются для разработки высокотемпературных термоэлектрических генераторов (для диапазона температур 500–800 °К) ввиду большого значения параметра термоэлектрической эффективности [1].

Кристаллическая структура Mg_2Ge – антифлюорит с кубической гранцентрированной решеткой и пространственной группой симметрии $Fm\bar{3}m$ (O^5_h). Зоны Бриллюэна (ЗБ) кристаллов групп Mg_2X и A^4 аналогичны, но у соединений Mg_2X в элементарной ячейке содержатся три

атома [2, 3]. Германид магния – непрямозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны $E_{gi} \cong 0,57-0,63$ эВ [4].

В работе [5] были исследованы спектры отражения от зеркальных свежих сколов монокристаллов Mg_2Ge в области 1,5–12,5 эВ при $T = 293$ °К и 1,5–5 эВ при $T = 77$ °К. Всего в спектре отражения германида магния было обнаружено десять полос переходов [5]. Наиболее интенсивное структурное отражение было выявлено в области 1,5–5 эВ в виде шести полос. Наиболее корректно спектры отражения Mg_2Ge исследованы на сколах монокристаллов в атмосфере азота при 77 °К в области 1–11 эВ [6]. Результаты работ [5, 6] в основном согласуются по положению и количеству выявленных структур спектров $R(E)$. Оптические спектры германида магния более структурны по сравнению со спектрами кристаллического германия.

Электронная структура кристалла Mg_2Ge рассчитана различными методами [2, 3, 7–9]. Максимум верхней валентной зоны (ВВЗ) во всех теоретических расчетах расположен в точке Γ_{15} , а минимум нижней зоны проводимости (НЗП) расположен около точки X_1 или в точке X_3 [2], которые близки между собой.

Согласно расчетам [3] вершина валентной зоны образована состояниями p -симметрии, а самая нижняя зона проводимости – состояниями s -симметрии. Предполагается, что четыре s -электрона атомов Mg и четыре s и p -электрона Ge образуют восемь валентных электронов верхней валентной зоны элементарной ячейки германида магния. Зонные структуры Mg_2Ge и Mg_2Si весьма подобны. Расчетные значения E_{gi} (1,6 эВ) [3] оказались более чем в два раза выше экспериментальных (0,74 эВ) [10]. Наиболее подробный расчет энергетических зон проводился методом эмпирического псевдопотенциала [2]. В [8] методом псевдопотенциала рассчитаны зоны трех соединений (Mg_2Si , Mg_2Ge и Mg_2Sn) с использованием четырех форм-факторов для Si, Ge, Sn и двух форм-факторов для Mg. Результаты расчетов получились весьма схожими с данными [2]. Авторами [9] по методу LDA были получены сильно заниженные (примерно в 4–7 раз) значения энергии непрямой запрещенной зоны E_{gi} по сравнению с экспериментальными данными. Теоретические значения энергий максимумов спектра ϵ_2 равны 2,12, 2,9, 3,6 эВ. Предполагается, что они обусловлены междузонными переходами в точках Γ , L , X , ΔB . В работе [7] изучено влияние экситонных эффектов на оптические свойства германида магния, где были получены энергии междузонных переходов в точках Γ , L , X , а также E_{gi} и спектр ϵ_2 , весьма близкие к экспериментальным данным.

В экспериментальном спектре отражения Mg_2Ge в области 1–11 эВ [6] наблюдаются пять максимумов и ступенек, а теоретические спектры

$\varepsilon_2(E)$ содержат лишь два-три максимума. Это указывает на несовершенство теоретических расчетов. Кроме того, в них нет аргументированных однозначных выводов о локализации этих максимумов в ЗБ. Таким образом, для преодоления противоречий между многочисленными теоретическими расчетами электронной структуры германида магния и с имеющимися экспериментальными данными требуется более детальная информация об особенностях полос переходов в оптических спектрах Mg_2Ge , чем только известные спектры отражения 1–12 эВ в работах [5, 6]. Чтобы получить новую информацию об особенностях оптических спектров и оптических свойств системы Mg_2Ge , интересно сопоставить оптические спектры Mg_2Ge и Ge.

Методика расчетов

Экспериментально в широкой области энергий, как правило, определяется только спектр отражения $R(E)$. Иногда, применяя весьма сложные приближенные методики, получают из интегральной функции потерь объемные ($-\text{Im} \varepsilon^{-1}$) и поверхностные ($-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$) характеристические потери электронов. Кроме того, эллипсометрическими методами в области ($E_{gd} \sim 5,5$ эВ) измеряют спектры $\varepsilon_1(E)$ и $\varepsilon_2(E)$. Поэтому полный комплекс фундаментальных оптических функций обычно рассчитывается на основе экспериментального спектра отражения по специальным компьютерным программам с использованием интегральных соотношений Крамерса – Кронига и известных аналитических формул связи оптических функций между собой. Используемые методики расчетов подробно изложены и многократно применялись [11–13].

Результаты расчетов и их обсуждение

Расчеты спектров полного комплекса оптических функций монокристалла Mg_2Ge были выполнены на основе экспериментальных спектров отражения работы [6] в области 1–11 эВ при $T = 77$ °К (рис. 1, табл. 1). В экспериментальном спектре отражения наблюдается пять максимумов и одна ступенька. Самый интенсивный максимум находится при энергии 3,4 эВ, за ним расположен максимум с дублетной структурой при 4,15 и 4,50 эВ. Остальные структуры наблюдаются при энергиях 2,49, 3,05, 5,65 эВ. В спектрах $\varepsilon_1(E)$, $n(E)$, $\sigma(E)$ имеются максимумы поперечных аналогов полос спектра отражения (рис. 1, а). Максимумы $\varepsilon_1(E)$, $n(E)$ значительно уже структур отражения и смещены относительно максимумов $R(E)$ в область меньших энергий на $\sim 0,06$ – $0,35$ эВ или совпадают. Спектры $\varepsilon_2(E)$, $\alpha(E)$, $k(E)$, $\varepsilon_2 E^2(E)$ (рис. 1, б) аналогичны по структуре между собой и со спектрами R , ε_1 , n , σ . В спектре $\varepsilon_2(E)$ проявляется пять структур, самая интенсивная полоса находится при энергии 3,05 эВ.

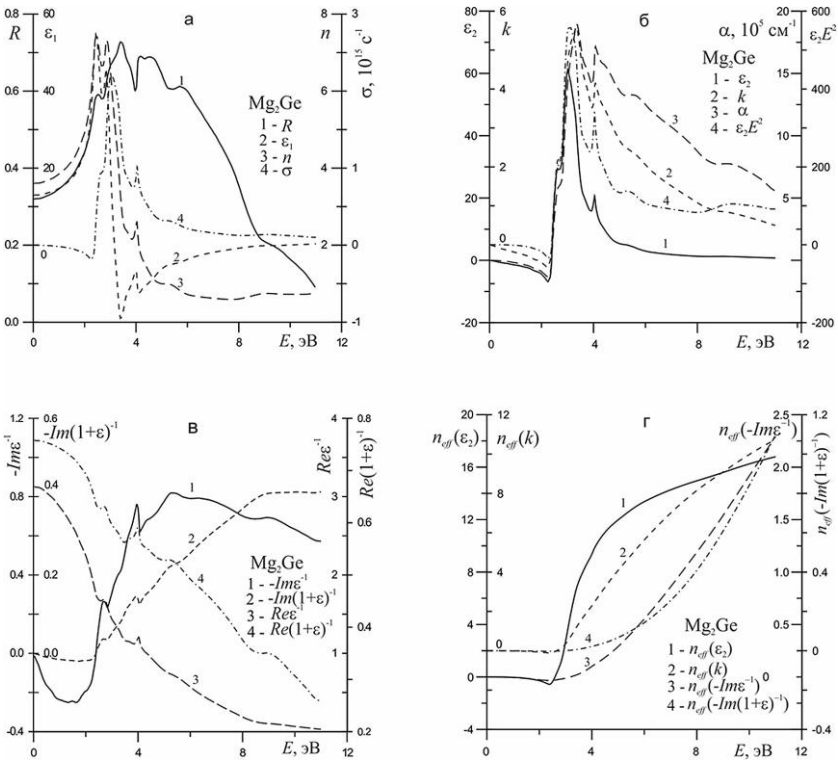


Рис. 1. Экспериментальный спектр $R(E)$ (1) [9] и расчетные спектры $\varepsilon_1(E)$ (2), $n(E)$ (3), $\sigma(E)$ (4) (а); $\varepsilon_2(E)$ (1), $\alpha(E)$ (2), $k(E)$ (3), $\varepsilon_2 E^2(E)$ (4) (б); $-\text{Im}\varepsilon^{-1}(E)$ (1), $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}(E)$ (2), $\text{Re}\varepsilon^{-1}(E)$ (3), $\text{Re}(1+\varepsilon)^{-1}(E)$ (4) (в) и n_{eff} , рассчитанные на основе ε_2 (1), k (2), $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$ (3), $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ (4) (г), при 77 °К кристалла Mg₂Ge

Максимумы структур в спектрах $\alpha(E)$, $k(E)$, $\varepsilon_2 E^2(E)$ смещены относительно спектра $\varepsilon_2(E)$ в область больших энергий незначительно ($\Delta E \approx 0,05-0,35$ эВ) либо совпадают. В спектрах $\alpha(E)$ и $\varepsilon_2 E^2(E)$ структура при энергии 3,4 и 3,1, соответственно, является наиболее интенсивной и для функции $\alpha(E)$ достигает значения $\approx 1,9 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$. Наиболее интенсивные структуры в спектре отражения германида магния расположены в области энергий 2–6 эВ, в то время как функция $\varepsilon_2(E)$, пройдя максимальное значение при энергии 3,05 эВ, далее при больших энергиях

резко идет на спад. В спектре объемных характеристических потерь электронов $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$ (рис. 1, в) наблюдается шесть структур: три максимума при энергиях 2,74, 4,0 и 5,4 эВ и три ступеньки при 3,25, 3,6, 4,4 эВ соответственно. В спектре поверхностных характеристических потерь электронов $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ наблюдаются структуры-аналоги максимумов и ступенек спектра объемных потерь. При этом структуры в спектре $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ либо совпадают по энергии, либо смещены на $\sim 0,1$ эВ в область меньших энергий относительно их аналогов в спектре $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$. Продольные полосы переходов в спектрах объемных и поверхностных характеристических потерь электронов заметно шире их поперечных аналогов в спектре $\varepsilon_2(E)$ и либо смещены относительно их в область больших энергий на $\sim 0,1-0,2$ эВ, либо совпадают с ними.

Таблица 1. Энергии (эВ) максимумов и ступенек (в скобках) оптических функций кристалла Mg_2Ge

№	R	ε_1	ε_2	n	k	α	$\varepsilon_2 E^2$	$-\text{Im} \varepsilon^{-1}$	$-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$	σ
1	2,49	2,43	2,7	2,43	(2,7)	(2,7)	2,7	2,74	2,73	(2,6)
2	(3,05)	2,9	3,05	2,9	—	—	3,1	(3,25)	(3,25)	3,05
3	3,4	—	(3,3)	(3,4)	3,4	3,4	—	(3,6)	—	(3,3)
4	4,15	4,0	4,1	4,02	4,1	4,1	4,05	4,0	4,0	4,03
5	4,50	—	—	—	(4,4)	(4,5)	—	(4,4)	(4,3)	—
6	5,65	(5,3)	(5,3)	(5,3)	(5,5)	(5,65)	(5,4)	5,4	(5,4)	(5,3)

На рис. 1, г представлены спектры функций $n_{\text{eff}}(E)$, рассчитанные по $\varepsilon_2(E)$, $k(E)$, $-\text{Im} \varepsilon^{-1}$, $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ в области 1–11 эВ. Кривая $n_{\text{eff}}(\varepsilon_2)$ имеет резкий длинноволновый край при $E \approx 2,3$ эВ, далее возрастает до значений $\approx 3,3$ при ~ 6 эВ, а затем при больших энергиях почти линейно растет до ≈ 4 при 11 эВ, при этом максимально возможное число валентных электронов в формульной единице соединения составляет 8. Функция $n_{\text{eff}}(k)$, также начиная с энергии $\approx 2,3$ эВ, почти линейно растет от нулевых значений до значений $\approx 4,5$ при 11 эВ. Кривые $n_{\text{eff}}(-\text{Im} \varepsilon^{-1})$ и $n_{\text{eff}}(-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1})$ очень медленно начинают возрастать примерно от энергии $\sim 3,5$ эВ, достигая значений $\sim 0,28$ и $\sim 2,5$ соответственно при 11 эВ. Кривая $n_{\text{eff}}(-\text{Im} \varepsilon^{-1})$ при ~ 6 эВ расположена ниже кривой $n_{\text{eff}}(\varepsilon_2)$ в $\sim 26,4$ раза, при ~ 11 эВ в $\sim 14,3$ раза. Это свидетельствует о том, что полосы поперечных переходов в области энергий около 6 эВ формируются светом в $\sim 26,4$ раза более эффективно, чем полосы их продольных аналогов, вызываемых потоком быстрых электронов, а в области больших энергий (~ 11 эВ) эта разница в формировании полос переходов снижается почти в 2 раза. Таким образом, так как взаимодействия света и по-

тока быстрых частиц с веществом совершенно разные, то в основном спектр функции $\varepsilon_2(E)$ формируется большей частью валентных электронов в области интенсивного поглощения, а спектры характеристических потерь при этом формируются очень слабо.

Таблица 2. Энергии (эВ) максимумов и ступенек (в скобках) оптических функций кристаллического Ge ($p\nu/ps$ – энергии плазменных полос объемных и поверхностных потерь электронов соответственно) [14]

№	R	ε_1	ε_2	n	k	α	$\varepsilon_2 E^2$	$-\text{Im } \varepsilon^{-1}$	$-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$	σ
1	2,13	2,02	2,35	2,02	2,41	(2,5)	2,45	2,82	2,82	2,42
2	(3,4)	3,09	(3,4)	3,16	(3,4)	–	–	4,05	4,09	(3,4)
3	4,57	(4,1)	4,44	(4,4)	4,50	4,50	4,43	5,77	5,64	4,44
4	6,11	5,65	(5,8)	(5,8)	5,84	5,98	5,84	–	–	5,81
$p\nu/ps$	–	–	–	–	–	–	–	16,06	11,62	–

При переходе от Mg_2Ge к германию приведенные выше структурные особенности оптических спектров очень существенно меняются (табл. 2). В экспериментальном спектре отражения Ge наблюдаются три максимума при энергиях $E = 2,13, 4,57, 6,11$ эВ и ступенька при $E \sim 3,4$ эВ. Функции реальной части диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1(E)$ и показателя преломления $n(E)$ германия схожи по структуре со спектром отражения, при этом в ε_1 третья структура вырождается в ступеньку, а в n третья и четвертая структуры вырождаются в ступеньки. В спектре $\varepsilon_1(E)$ имеется три максимума при $E = 2,02, 3,09, 5,65$ эВ и ступенька при $E \sim 4,1$ эВ, а в спектре показателя преломления германия наблюдаются два максимума при $2,02, 3,16$ эВ и две ступеньки при $E \sim 4,4, 5,8$ эВ. Спектр оптической проводимости $\sigma(E)$ содержит три максимума при $E = 2,42, 4,44, 5,81$ эВ и ступеньку при $E \sim 3,4$ эВ. В расчетном спектре $\varepsilon_2(E)$ германия проявляются две структуры, имеющие аналоги в спектре отражения: два интенсивных максимума при энергиях $2,35, 4,44$ эВ и две ступеньки при $E \sim 3,4, 5,8$ эВ. В спектрах коэффициента поглощения α , объединенной плотности состояний $\varepsilon_2 E^2$ и показателя поглощения германия имеются структуры, аналогичные структурам $\varepsilon_2(E)$, но в них четвертая полоса проявляется как максимум, а в $\alpha(E)$ и $\varepsilon_2 E^2(E)$ вторая структура отсутствует. Спектр объемных характеристических потерь электронов $-\text{Im } \varepsilon^{-1}$ содержит четыре структуры: три максимума при $E = 2,82, 4,05, 5,77$ эВ и интенсивную полосу, которая ответственна за коллективные возбуждения всех валентных электронов при $E_{pv} = 16,06$ эВ. Спектр поверхностных характеристических потерь электронов $-\text{Im}(1+\varepsilon)^{-1}$ по структуре схож со спектром объемных потерь, но плазмон в нем находится при энергии $E_{ps} = 11,62$ эВ. Смещение меж-

ду ними составляет $\Delta E = E_{pv} - E_{ps} = 4,44$ эВ. В спектре эффективного количества валентных электронов $n_{eff}(\epsilon_2)$, рассчитанного по спектру $\epsilon_2(E)$, наблюдается резкое увеличение интенсивности в области 2–6 эВ, затем в области 6–12 эВ наблюдается плавное увеличение интенсивности. В спектре $n_{eff}(k)$ нет резкого роста интенсивности, его интенсивность плавно увеличивается начиная с 2 эВ, а интенсивность кривых $n_{eff}(-\text{Im}\epsilon^{-1})$ и $n_{eff}(-\text{Im}(1+\epsilon)^{-1})$ также начинает плавно возрастать с 8 эВ [14].

Сопоставим оптические спектры и электронные структуры германия и Mg_2Ge . Справедливо предположить, что валентные зоны Mg_2Ge , как и у германия, в основном обусловлены орбиталями германия. Поэтому наибольшие различия между электронными структурами обоих соединений следует ожидать в области нижней зоны проводимости. Самая нижняя зона проводимости германия, отвечающая за прямые междононные переходы, расположена выше минимума зоны проводимости всего на $\sim 0,2$ эВ. Поэтому для германия роль спин-орбитальных эффектов довольно высока. У Mg_2Ge при энергиях выше E_{gi} проявляются сравнительно интенсивные переходы вместо широкой области более слабых полос переходов у чистого германия. Кроме этой важной особенности весьма значительных различий между интенсивностями полос переходов Mg_2Ge и германия добавляется еще одно существенное различие: в области энергий 2–6 эВ в экспериментальных спектрах отражения германита магия имеется четыре хорошо выраженных максимума, в том числе с дублетной структурой, тогда как у германия в этой области наблюдаются существенно менее выраженные структуры. Аналогичные структурные различия присутствуют и у спектров других оптических функций обоих кристаллов. Многочисленные теоретические расчеты Mg_2Ge , к сожалению, пока являются сильно упрощенными. Это не позволяет пока объяснить природу указанных существенных различий в особенностях оптических спектров обоих материалов.

Заключение

Впервые определены спектры шестнадцати фундаментальных поперечных и продольных оптических функций монокристалла силицида магния в области энергии 1–11 эВ при 77 °К вместо известного спектра отражения и рассчитанного по нему спектра диэлектрической проницаемости. Расчеты выполнены на основе экспериментального спектра отражения с помощью специальных компьютерных программ. Установлены и сопоставлены основные особенности полученных интегральных спектров Mg_2Ge со спектрами расчетных оптических функций кристаллического германия. Полученная обширная новая информация позволит

количественно и детально анализировать теоретические расчеты зон и экситонов Mg_2Ge , а также родственных ему кристаллов в широкой области энергии. Установлены существенные структурные различия в оптических спектрах кристаллического германия и Mg_2Ge в широкой области энергии. Для выяснения их природы необходимы дальнейшие более детальные расчеты.

Список литературы

1. Pulikkotil, J. J. Doping and temperature dependence of thermoelectric properties in $\text{Mg}_2(\text{Si},\text{Sn})$ / J. J. Pulikkotil, D. J. Singh, S. Auluck, M. Saravanan, D. K. Misra, A. Dhar, R. C. Budhani // Physical Review B. 2012. Vol. 86. No. 15. Article ID 155204. DOI: [10.1103/PhysRevB.86.155204](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.155204).
2. Au-Yang, M. Y. Electronic structure and optical properties of Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn / M. Y. Au-Yang, M. L. Cohen // Physical Review. 1969. Vol. 178. No. 3. Pp. 1358–1364. DOI: [10.1103/PhysRev.178.1358](https://doi.org/10.1103/PhysRev.178.1358).
3. Lee, P. M. Electronic structure of magnesium silicide and magnesium germanide // Physical Review. 1964. Vol. 135. No. 4A. P. A1110–A1114. DOI: [10.1103/PhysRev.135.A1110](https://doi.org/10.1103/PhysRev.135.A1110).
4. Lott, L. A. Infrared absorption in Mg_2Ge / L. A. Lott, D. W. Lynch // Physical Review. 1966. Vol. 141. No. 2. P. 681–686. DOI: [10.1103/PhysRev.141.681](https://doi.org/10.1103/PhysRev.141.681).
5. Спектры отражения и структура зон кристаллов типа Mg_2Si / В. В. Соболев, В. И. Донецких, Е. Б. Соколов и др. // Физика твердого тела. – 1970. – Т. 12, № 9. – С. 2687–2691.
6. Scouler, W. J. Optical properties of Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn from 0.6–11.0 eV at 77°K // Physical Review. 1969. Vol. 178. No. 3. Pp. 1353–1357. DOI: [10.1103/PhysRev.178.1353](https://doi.org/10.1103/PhysRev.178.1353).
7. Arnaud, B. Electron-hole excitations in Mg_2Si and Mg_2Ge compounds / B. Arnaud, M. Alouani // Physical Review B. 2001. Vol. 64. No. 3. Article ID 033202. DOI: [10.1103/PhysRevB.64.033202](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.033202).
8. Aymerich, F. Pseudopotential band structures of Mg_2Si , Mg_2Ge , Mg_2Sn and of the solid solution $\text{Mg}_2(\text{Ge}, \text{Sn})$ / F. Aymerich, G. Mula // physica status solidi (b). 1970. Vol. 42. No. 2. Pp. 679–704. DOI: [10.1002/pssb.19700420224](https://doi.org/10.1002/pssb.19700420224).
9. Benhalal, O. First principles calculations of the structural, electronic and optical properties of IIA–IV antiferroite compounds / O. Benhalal, A. Chahed, S. Laksari, B. Abbar, B. Bouhafs, H. Aourag // Physica status solidi (b). 2005. Vol. 242. No. 10. Pp. 2022–2032. DOI: [10.1002/pssb.200540063](https://doi.org/10.1002/pssb.200540063).
10. Busch, G. Elektrische eigenschaften der intermetallischen verbindungen Mg_2Si , Mg_2Ge , Mg_2Sn und Mg_2Pb / G. Busch G., U. Winkler // Physica. 1954. Vol. 20. No. 7. Pp. 1067–1072. DOI: [10.1016/S0031-8914\(54\)80236-9](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(54)80236-9).
11. Соболев, В. В. Оптические свойства и электронная структура неметаллов. I. Введение в теорию / В. В. Соболев. – Москва ; Ижевск : Ин-т комп. исслед., 2012. – 583 с.

12. *Соболев, В. В.* Оптические свойства силицида магния / В. В. Соболев, В. Вал. Соболев // Аморфные и микрокристаллические полупроводники : сб. тр. X Междунар. конф. – Санкт-Петербург : Изд-во Политех. ун-та, 2016. – С. 364.

13. Усовершенствованный метод разложения интегральных оптических спектров на элементарные компоненты с помощью диаграмм Арганда / А. И. Калугин, Е. А. Антонов, Д. А. Перевошиков, В. Вал. Соболев // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21, № 4. – С. 604–610.

14. *Шушков, С. В.* Оптические свойства и электронная структура системы кремний – германий : дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.01, 01.04.07. – Ижевск : 2013. – 270 с.

V. Val. Sobolev, DSc in phys. and math., associate professor,
dean of the Faculty of Mathematics and Natural Sciences

E-mail: Soboleff.val@yandex.ru

Kalashnikov Izhevsk State Technical University, Izhevsk, Russian Federation

Comparison of the Optical Spectra of Magnesium and Germanium Germanide

In this work, the spectra of sixteen fundamental optical functions of Mg_2Ge in the range 0-11 eV at 77 °K are determined. Their main features and general laws are established. They contain six maxima and shoulders due to interband transitions and metastable excitons. The calculations were carried out on the basis of the known experimental reflection spectrum in the range of 0-11 eV at 77 °K using computer programs created on the basis of the Kramers-Kronig relations and the known analytical formulas for the relationship between optical functions. The spectra of the optical functions of Mg_2Ge and crystalline germanium are compared, and their significant structural differences are established in a wide energy range.

Keywords: magnesium germanide, germanium, optical function, maximum, shoulder, interband transition, exciton, permittivity, Kramers-Kronig relations, bulk and surface energy losses.