# Absorción óptica a altas presiones del TLGaSe<sub>2</sub>

Ch. Power, I. Molina, L. Chacón y J. González\* Centro de Estudios de Semiconductores, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, 5101 Mérida, Venezuela, \*DCITIMAC - Malta Consolider Team, Universidad de Cantabria, Santander, España, e-mail: ch\_power@hotmail.com

A. Jagui Pérez-Kuroki

Hiroshima University Graduate School for International Development and Cooperation, Division of Development Science, Departament of Development Technology Kagamiyama, 1-5-1, Higashi Hiroshima, 739-8529, Japan.

J.C. Chervin

Institut de Minéralogie et de Physique des Milieux Condensés, CNRS UMR 7590, Université Pierre et Marie Curie, 140 rue de Lourmel, F-75015 Paris, France.

Recibido el 27 de mayo de 09; aceptado el 31 de mayo de 2010

En el presente estudio hemos medido el espectro de transmisión óptica normal no polarizado en el compuesto semiconductor laminar TIGaSe<sub>2</sub>, hasta la presión de 27.6 GPa. Nuestros resultados muestran que en el rango del visible existe la contribución de dos brechas de energía directas, que presentan una dependencia lineal con la presión. La transición débil  $E_A(\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,1}^c)$ , asignada a la brecha fundamental de energía, decrece hasta los 0.9 GPa con un coeficient lineal de -5.31×10<sup>-2</sup> eVGPa<sup>-1</sup> y la transición  $E_B(\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c)$  muestra un coeficient de -9.95×10<sup>-2</sup> eVGPa<sup>-1</sup> hasta 5.3 GPa (límite de presión en el espectro visible). Los resultados en el infrarrojo no muestran la presencia de la transición  $E_A$ , dejando ver solamente el comportamiento de la segunda transición justo hasta la presión de metalización 24.6 GPa. En el rango de presión estudiado de 0.0 a 27.6 GPa, la transición  $E_B$  muestra un comportamiento no lineal con la presión de coeficient cuadrático  $1.83 \times 10^{-3}$  eVGPa<sup>-2</sup>.

Descriptores: Semiconductores I-III-VI2; propiedades ópticas; infrarrojo; alta presiones.

In this paper the spectrum of optical normal transmission not polarized of TIGaSe<sub>2</sub> is measured as a function of pressure up to 27.6 GPa at room temperature. Our results show that in the range of the visible exist the contributions of two direct gaps of energy, which present a linear dependence with the pressure. The weak transition  $E_A(\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,1}^c)$  assigned to the fundamental gap of energy, decreases up to 1.5 GPa with a linear coefficien of  $-5.31 \times 10^{-2}$  eVGPa<sup>-1</sup> and the transition  $E_B(\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c)$  shows a coefficien of  $-9.95 \times 10^{-2}$  eVGPa<sup>-1</sup> up to 5.3 GPa (limit of pressure in the visible spectrum). The results in the infrared do not show the presence of the transition  $E_A$  allowing to see only the behavior of the second transition rightly up to the pressure of metallization 24.6 GPa. In the range of pressure studied from 0.0 to 27.6 GPa, the transition  $E_B$  shows a not linear behavior with the pressure of quadratic coefficien  $1.83 \times 10^{-3}$  eVGPa<sup>-2</sup>.

Keywords: I-III-VI2 semiconductor; optical properties; infrared; high pressure.

PACS: 74.25.Gz; 74.62.Fj; 78.30.-j; 78.40.Fy

### 1. Introducción

Los estudios de las propiedades ópticas de los semiconductores laminares se han desarrollado desde la década de los 40 [1], posteriormente tomaron un particular interés hacia las posibles aplicaciones en optoelectrónica y óptica no-lineal, dadas sus propiedades de fotoconductividad [2-4]. Dentro de estos materiales existe el grupo de semiconductores ternarios TIBX<sub>2</sub>, (B = Ga o In, átomo metálico), y (X = Se o S átomo calcógeno). En este trabajo nos concentramos en estudiar la absorción óptica del compuesto semiconductor TIGaSe<sub>2</sub> [5-8] en función de la presión hidrostática, así como también las posibles transiciones de fase, que puede experimentar en una amplia región de energía (visible e infrarrojo). Entendemos que en compuestos laminares bajo presión, existe la posibilidad de generar una transición de sólido 2-dimensional a uno 3-dimensional [9-17].

En condiciones ambientales el TlGaSe<sub>2</sub> cristaliza en una estructura monoclínica con simetría  $C_{2/c} \equiv C_{2h}^6$ , y parámetros de red: a=10.772 Å, b=10.771 Å, c=15.636 Å y  $\beta$ =100.06° [18]. La estructura de bandas del semiconductor TlGaSe<sub>2</sub>, fue calculada por S.G. Abdullaeva y N.T. Mamedov [19,20] usando el método de pseudo-potencial, catalogándolo como un compuesto de brecha de energía indirecta. De acuerdo con estos cálculos, el máximo de la banda de valencia está localizado en el punto  $\Gamma$  con simetría  $\Gamma_2^v$  y el mínimo de la banda de conducción se encuentra a 2.05 eV [12] desplazado 1/4 de  $\Gamma$ , a lo largo de de la línea  $\Gamma$ -Y ( $\Delta$ ), corroborado experimentalmente por S. Kashida *et* al. [21] y V. Grivickas [22] en el año 2006. Adicionalmente existen en la banda de conducción en la dirección  $\Gamma$ , dos puntos de simetría  $\Gamma^c_{3,1}$  y  $\Gamma^c_{3,2}$  con sólo una diferencia de energía de 120 meV y 250 meV, respectivamente, con respecto al mínimo indirecto. Estas transiciones son ambas permitidas para luz no polarizada y con una muy fuerte absorción ( $\alpha \sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ) para muestras delgadas.

Una transición de fase estructural es reportada por S. Ves a 1.85 GPa. En un trabajo de espectroscopia Raman en función de la presión de TlGaSe<sub>2</sub> reportado por W. Henkel *et al.*, [10] observan una posible transición de fase a partir de 2.0 GPa a T = 300 K.

En estudios previos de absorción óptica en el TlGaSe<sub>2</sub> [12,23,24] bajo sometimiento a presión se observa el desplazamiento de la curva del coeficient de absorción hacia bajas energías al aumentar la presión; comportamiento que generalmente es positivo para brechas directas en muestras tipo bulto o tridimensionales, pero recordemos que nuestra muestra es un laminar y, al igual que en muchos otros laminares, presenta un coeficient negativo [23,25], dada la relación que existe entre las débiles interacciones intercapas comparadas con las interacciones de las intracapas y su comportamiento en presión.

### 2. Procedimiento experimental

El monocristal de TlGaSe2 usado en este trabajo fue suministrado por N. Mamedov y S. Iida, siendo crecido por el método Bridgman [16], en la Universidad de Tecnología de Nagaoka, Japón. Para obtener los espectros de absorción y determinar las posibles transiciones de fase en función de la presión a temperatura ambiente, se realiza la detección del espectro transmisión óptica normal con luz no polarizada en un intervalo de presiones entre 0.0 y 27.6 GPa. Fueron estudiados dos rangos de energía, el espectro visible (EV) y el infrarrojo (IR), variando para cada intervalo la presión entre 0.0-5.3 GPa y 0.0-27.6 GPa respectivamente, utilizando muestras de  $10 \times 74 \times 74 \ \mu m^3$  (EV) y  $12 \times 240 \times 240 \ \mu m^3$  (IR). Las medidas de presión para el intervalo EV fueron obtenidas utilizando una celda de presión de membrana de yunque de diamante [27,28] en combinación de un sistema de micro-óptica, utilizando metanol-etanol (4:1) como fluid hidrostático, en el intervalo de longitudes de onda entre 450 y 800 nm. Para las medidas en el infrarrojo se utilizó la técnica de espectroscopia de infrarrojo por transmisión, un Perkin-Elmer 1600 interferómetro, acoplado a un microscopio infrarrojo, utilizando tres objetivos reflectante del tipo Cassegrain. La detección es realizada por un MTC, enfriado a nitrógeno liquido, en el intervalo de longitudes de onda entre 1250 y 2000ñm. La celda de diamante utilizada es una celda del tipo Chervin

TABLA I. Resultados del ajuste del espectro de absorción óptica a diferentes presiones, (T=300 K, rango del espectro visible) usando el modelo teórico de Elliot-Toyozawa para los valores de energía correspondientes al primer frente ( $E_A$ ).

Presión (GPa)	$E_A$ (eV)	C' (× $10^3$ cm <sup>-1</sup> )	$\Gamma c (\times 10^{-2} eV)$
0.0	2.34	1.39	6.45
0.6	2.27	1.60	8.44
0.9	2.23	1.70	7.80



FIGURA 1. Variación de la forma espectral del coeficient de absorción del TlGaSe<sub>2</sub> en función de la presión aplicada T=300 K, rango del espectro visible: • 0.0 GPa,  $\bigtriangledown$  0.6 GPa,  $\blacksquare$  0.9 GPa,  $\diamondsuit$  1.5 GPa.

[28] provista de diamantes del tipo IIA de gran apertura óptica compatible con los objetivos Cassegrain, cargada con argón liquido como medio de transmisión hidrostático, por medio de un sistema de captura criogénica. El sistema de detección de la presión en ambos casos se utilizó el espectro de luminiscencia del rubí [29].

Las medidas del coeficient de absorción son obtenidas por medio de la trasmitancia (T) de la muestra y usando la expresión

$$\alpha = \frac{1}{d} \left[ 2\ln(1-R) - \ln(Aop) - \ln(T\exp{-T\min}) \right], \quad (1)$$

donde  $R = [(\mathbf{n}_M - \mathbf{n}_m)^2 / (\mathbf{n}_M + \mathbf{n}_m)^2]$  es el coeficient de reflect vidad,  $n_M$  es el índice de refracción de la muestra, n<sub>m</sub> es el índice de refracción del medio circundante (fluid hidrostático), en nuestro caso, el del metanol-etanol (4:1) para el intervalo del visible [30], y el del argón [28] para el intervalo del infrarrojo. La trasmitancia experimental viene dada por  $T_{exp}$  y d es el espesor de la muestra. Ciertas correcciones deben realizarse a los espectros determinados, tales son, la contribución de la luz parásita  $(T_{min})$  y la transmisión aparente, corregida por un factor constante  $A_{op}$  (en la región de transparencia), para ajustarla a la transmisión teórica  $\alpha$ =0. La curva del índice de refracción en el intervalo de energía estudiada del TlGaSe<sub>2</sub> a temperatura y presión ambiente,  $n_M(h\nu)=3.92-1.40(h\nu)+0.46(h\nu)^2$ , es obtenida a partir de la regresión cuadrática de la parte real del índice de refracción publicado por J.A. Kalomiros et al., [3]:

#### 3. Resultados y discusión

En la Fig. 1 se muestran los espectros de absorción del TlGaSe<sub>2</sub> en el intervalo del espectro visible, siendo posible distinguir la contribución de dos frentes de absorción hasta presiones inferiores a 1.5 GPa. Para coeficiente de absorción ( $\alpha$ ) <5000 cm<sup>-1</sup> se observa un primer frente de absorción (E<sub>A</sub>) asociado a la transición directa correspondiente a

 $\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,1}^c$ , y adicionalmente, existe otro frente de absorción directo mucho más fuerte (E<sub>B</sub>), el cual representa la absorción debida al desdoblamiento de la banda de conducción y ocurre entre  $\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c$ ; estos resultado han sido observados por otros autores [12,21,22].

El análisis realizado para determinar de forma cuantitativa la dependencia en presión de la brecha de energía del frente  $E_A$  se basa en la aplicación del modelo de Elliot-Toyozawa [31,32] definid por la relación:

$$\alpha_{(h\nu)} = \frac{C_0}{n_{(h\nu)}h\nu} \left[ \sum_{a=1}^{2R_o} \frac{\Gamma a/2}{a^3} \frac{\Gamma a/2}{(h\nu - Ea)^2 + (\Gamma a/2)^2} + \int_{Eg}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-2\pi Z})} \frac{\Gamma c/2}{(h\nu - Eg)^2 + (\Gamma c/2)^2} dE \right],$$
(2)

donde n representa el índice de refracción, Ro es el Rydberg efectivo del excitón,  $\Gamma a$ ,  $\Gamma c$  son el ancho de línea a media altura de la lorentziana en los picos excitónicos y del continuo, Eg es la brecha fundamental de energía directa, Ea es la energía de los estados de enlace del excitón y  $Z^2 = \text{Ro} / (h\nu - \text{Eg})$ . El primer término de la Ec. (2) corresponde a la serie excitónica y el segundo término ( $\Re$ ) al continuo del excitón (n= $\infty$ ). La contribución del primer término es despreciable en nuestro caso, debido a que las medidas fueron realizadas a temperatura ambiente (kT  $\approx 25$ meV), en consecuencia el excitón está disociado. Despreciando la serie excitónica y resolviendo el término  $\Re$  de la Ec. (2) obtenemos:

$$\alpha_{(h\nu)} = C' \left[ \frac{\pi}{2} + \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left[ \frac{(h\nu - Eg)}{\Gamma_c/2} \right] \right], \qquad (3)$$

donde los parámetros de ajuste C', Eg,  $\Gamma_c/2$  representan la amplitud a media altura, la brecha de energía y el ancho a media altura del pico asociado al continuo del excitón.



FIGURA 2. Variación del coeficient de absorción del TIGaSe<sub>2</sub> en función de la presión aplicada T=300 K, espectro visible: • 0.0 GPa,  $\forall$  0.6 GPa,  $\blacksquare$  0.9 GPa. Ajuste del Modelo de Elliot-Toyozawa (M<sub>E-T</sub>), en el primer frente (- - ). Las curvas relativas al segundo frente E<sub>B</sub>, también se observan en la figur luego de la substracción de la contribución del primer frente.



FIGURA 3. Absorción del TIGaSe<sub>2</sub> en función de la presión < 5.3 GPa, (T=300 K), • 1.5 GPa, • 1.8 GPa,  $\checkmark$  2.4 GPa,  $\triangle$  2.7 GPa,  $\blacksquare$  3.5 GPa,  $\Box$  4.3 GPa,  $\blacklozenge$  5.3 GPa.



FIGURA 4. Dependencia de las brechas fundamental con respecto a la presión, del TIGaSe<sub>2</sub>. (T = 300 K en el rango del infrarrojo). 1 = 0.0 GPa, 2 = 1.71 GPa, 3 = 2.65 GPa, 4 = 7.56 GPa, 5 = 13.64 GPa, 6 = 17.7 GPa, 7 = 19.2 GPa, 8 = 22.9 GPa, 9 = 24.6 GPa, 10 = 25.6 GPa, 11 = 27.6 GPa.

En la Fig. 2 se muestra un ajuste obtenido de las brechas de energía directas ( $E_A$  y  $E_B$ ) del TIGaSe<sub>2</sub>, a diferentes presiones.

Las energías asociadas al frente  $E_B$  pueden ser descritas a partir del modelo  $(\alpha h \nu)^2$  vs.  $h\nu$ , las cuales corresponden a la transición directa permitida entre bandas parabólicas  $(\Gamma_2^v \rightarrow \Gamma_{3,2}^c)$ , un grafic de  $(\alpha h \nu)^2$  vs.  $h\nu$  se ha realizado y hemos considerado la regresión lineal y su extrapolación a  $(\alpha h \nu)^2 = 0$ , como el valor de la energía  $E_B$ , para las diferentes presiones P > 1.5 GPa.

En la Fig. 3, se observa el comportamiento del coeficient de absorción para presiones entre 1.5 y 5.3 GPa, en el intervalo comprendido entre 1.55-2.45 eV (espectro visible), donde no es posible observar la contribución de la transición

TABLA II. Resultados del ajuste de	l espectro de absorción óptica	a diferentes presiones,	(T=300 K, especti	o visible) usando	el modelo de
bandas parabólicas $\alpha h \nu = A(h \nu - Eg)^1$	<sup>/2</sup> , para los valores de energía	correspondientes al seg	gundo frente $(E_B)$ .		

Presión (GPa)	0.0	0.6	0.9	1.5	1.8	2.4	2.7	3.5	4.3	5.7
$E_B(eV)$	2.47	2.43	2.41	2.31	2.26	2.23	2.18	2.12	2.09	1.94

TABLA III. Resultados del ajuste del espectro de absorción óptica a diferentes presiones, (T=300 K, espectro infrarrojo) usando el modelo  $(\alpha h\nu)^2$  vs. h $\nu$ , para los valores de energía correspondientes al segundo frente (E<sub>B</sub>).

Presión (GPa)	17.7	19.2	22.9	24.6
$E_B(eV)$	0.87	0.90	0.76	0.65

TABLA IV. Resultados del comportamiento de las brechas de energía del TIGaSe<sub>2</sub> (T=300 K).

Transición	Presión	$E_{dir}$	а	b
	(GPa)	(eV)	$(eVGPa^{-1})$	$(eVGPa^{-2})$
$E_A\left(\Gamma_2^v\to\Gamma_{3,1}^c\right)$	0.0 - 0.9	2.30	$-5.31 \times 10^{-2}$	
$\mathcal{E}_B(\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c)$	- 5.3	2.47	$-9.95 \times 10^{-2}$	
	- 24.6	2.50	-0.12	$1.83 \times 10^{-3}$
E <sub>B</sub> *	- 14.0	2.54	$-9.07 \times 10^{-2}$	

\*S. Ves, espesor de la muestra d=3.5  $\mu$ m, (T=300 K) [12].



FIGURA 5. Frentes de energías directos del TIGaSe<sub>2</sub> en función de presión, comparados con los valores obtenidos por S. Ves [12], los símbolos representan:  $\blacksquare E_A (\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,1}^c), \circ E_B (\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c)$  en el EV,  $\bullet E_B (\Gamma_2^v \to \Gamma_{3,2}^c)$  en el IR,  $\Diamond$  S. Ves.

 $E_A$  En esta figur se muestra cómo los frentes de absorción del TlGaSe<sub>2</sub> se desplazan hacia menores energías, debido a la relación existente entre las débiles interacciones intercapas comparadas con las interacciones de las intracapas de los compuestos laminares. El cálculo de la determinación de la transición  $E_B$ , en estos espectros se realiza por el mismo modelo descrito anteriormente y los valores de las energías son representados en la Tabla II.

En la Fig. 4 se observa la variación en función de la presión (0.0-27.6 GPa) de los espectros de absorción del TlGaSe<sub>2</sub>, en el intervalo del IR (0.05-1.0eV). El frente de absorción asociado a la transición  $E_B (\Gamma_2^v \rightarrow \Gamma_{3,2}^c)$ , sólo es posible observarlo a partir de 17.7 GPa, mostrando por encima de los 25.6 GPa lo que podemos considerar una transición de fase de compuesto semiconductor a metal.

El estudio del TlGaSe<sub>2</sub> en un amplio intervalo de presiones y energías, evidencia un comportamiento en el coeficient de presión cuadrático de la forma dE/dP=Eo+aP+bP<sup>2</sup>. Este comportamiento es típico de los compuestos con estructura laminar, lo que ocurre es una modificac ón del tipo de enlace de la estructura inducido por la presión. En otras palabras, de un compuesto covalente bidimensional a uno covalente tridimensional, debido a la comprensión más rápida que reduce la distancia entre las capas, llegando a un punto en que el enlace tipo Van der Waals se transforma en un enlace covalente. Esto origina contribuciones de potenciales de deformación diferentes a partir de una cierta presión, originada por la modificac ón del tipo de enlace. El comportamiento en función de la presión del TlGaSe<sub>2</sub> es mostrado en la Fig. 5 y comparado con el reportado por S. Ves [12,14] y en la Tabla IV, se observan los resultados obtenidos de nuestro análisis.

Nuestros resultados presentan el mismo comportamiento de otros materiales de estructura laminar como el GaTe, Ga-Se y el InSe, de la familia III-VI, en los cuales su brecha de energía directa en función de la presión muestran un coefi ciente de presión negativo [33-38]. La evolución en presión de las brechas de energía directas del TIGaSe<sub>2</sub> hasta aproximadamente los 25 GPa es representada en la Tabla IV.

#### 4. Conclusiones

Nuestro estudio sobre la evolución del coeficient de absorción del TlGaSe<sub>2</sub> en función de la presión, nos arroja como resultados que para muestras del orden de 10  $\mu$ m, en condiciones de temperatura ambiente, es posible observar dos transiciones directas. Para presiones inferiores a los 0.9 GPa, observamos la brecha de energía directa  $E_A(\Gamma_2^v \rightarrow \Gamma_{3,1}^c)=2.301 \text{ eV}$  con un coeficient de presión lineal negativo de  $-5.31 \times 10^{-2} \text{ eVGPa}^{-1}$  y la segunda transición mucho más intensa  $E_B(\Gamma_2^v \rightarrow \Gamma_{3,2}^c)$  que se encuentra a 2.47 eV, es posible observarla hasta los 5.3 GPa con coeficient de  $-9.95 \times 10^{-2} \text{ eVGPa}^{-1}$ , una evolución similar es reportada por S. Ves [12], donde muestra a la transición directa  $E_B$  con un dE/dP= $-9.07 \times 10^{-2} \text{ eVGPa}^{-1}$ , este comportamiento también es observado en las brechas de energía direc-

ta de otros semiconductores con estructura laminar, tales como los de la familia de los III-V(InSe, GaTe y GaSe) [33-35]. Los coeficiente de presión negativos en las brechas directas de estos materiales son observados entre 1 y 3 GPa. Este comportamiento se evidencia por la alta compresibilidad de los enlaces de Van der Waals, existentes en las intercapas, los cuales se endurecen por el efecto de la presión, adquiriendo intensidades similares a los enlaces iónicos-covalentes, que existen entre los átomos intracapas. Este endurecimiento es el responsable de la transformación de sólido 2-dimensional a 3-dimensional en estos semiconductores laminares. Resulta notable que en la familia de semiconductores laminares  $TIGaX_2$  (X=S y Se) las presiones a las que se produce la transformación de sólido 2-dimensional a 3-dimensional son un orden de magnitud superiores, 13 GPa para el TlGaS<sub>2</sub> [39] y entre 25-30 GPa en TlGaSe2 que las presentes en los semiconductores laminares de la familia III-VI.

De nuestros resultados observamos que en el intervalo de presiones comprendido entre 0.0 y 24.6 GPa, como el TlGaSe<sub>2</sub>, muestra un coeficient de presión cuadrático que viene expresado por

$$E_B(P) = (2.50 \text{ eV}) + (-0.12 \text{ eV.GPa}^{-1})P + (1.83 \times 10^{-3} \text{ eV.GPa}^{-2})P^2.$$
(4)

- DCITIMAC-Malta Consolider Team, Universidad de Cantabria, Santander, España, e-mail: ch\_power@hotmail.com
- 1. E. Schwarz, Proc. Phys. Soc. A 62 (1949) 530.
- Kyeong Ae Yee, Thomas y A. Albright, J. Am. Chem. Soc. 113 (1991) 6475.
- J.A. Kalomiros, N. Kalkan, M. Hanias, A.N. Anagnostopoulos y K. Kambas, *Sol. Stat. Comm.* 96 (1995) 601.
- Ho-Jun Song, Sang-Hyun Yun y Wha-Tek Kim, J. Phys. Chem. Solids 56 (1995) 787.
- 5. G.D. Guseinov et al., Physics Letters A 33 (1970) 421.
- 6. I.A. Karpovich, Phys. Stat. Sol. (a) 4 (1971) K13.
- T.J. Isaacs y R.H. Hopkins, Journal of Crystal Growth 29 (1975) 121.
- T.J. Isaacs y J.D. Feichtner, *Journal of Solid State Chemistry* 14 (1975) 260.
- 9. E.A. Vinogradov et al., Phys. Stat. Sol. (b) 95 (1979) 383.
- 10. W. Henkel et al., vvhys. Rev. B 26 (1982) 3211.
- 11. Yu. G. Goncharov et al., Phys. Stat. Sol. (b) 153 (1989) 529.
- 12. S. Ves,  $\Gamma\Gamma \rightarrow \Gamma Phys. Rev. B$  40 (1989) 7892.
- 13. S. Block, G.L. Piermarini, V. Bean y A. Raynes, *Materials Science and Engineering: A* **127** (1990) 99.
- S. Ves, U. Schwarz, N.E. Christensen, K. Syassen y M. Cardona, *Phys. Rev. B* 42 (1990) 9113.
- 15. I.V. Blonskii, M.I. Bigun y D.D. Kolendritskii, *J. of Molecular Structure* **267** (1992) 221.

A partir de esta presión se observa de nuestros resultados en el IR, cómo el TlGaSe<sub>2</sub> experimenta una transición de fase estructural hacia una fase metálica 3-dimensional a una presión de transición entre 24.6 y 25.6 GPa. Adicionalmente y no presentados en extenso en este artículo, las transiciones de fase que experimenta el compuesto al someterlo a altas presiones son reversibles en todo el espectro de presiones estudiado, encontrando solamente una diferencia de 0.13 eV entre la transición  $E_A$  de partida y la  $E_A$  recuperada luego de un ciclo de presión hasta 27.6 GPa.

## Agradecimientos

Los autores de este proyecto queremos agradecer al CDCHT de la Universidad de Los Andes, Mérida Venezuela, por su soporte financiero a través del proyecto C-1570-08-05-B. Adicionalmente queremos agradecer a N. Mamedov del Osaka Prefecture University, Sakai 599-8531, Japan y a S. Iida, de la Universidad de Tecnología de Nagaoka, Japón, por suministrarnos las muestras necesarias para realizar esta investigación.

- 16. A. Kato et al., J. Phys. Chem. Solids 64 (2003) 1713.
- 17. C. Odin, Annual Reports on NMR Spectroscopy 59 (2006) 117.
- 18. D. Müller, H. Hahn y Z. Anorg, Allg Chem. 438 (1978) 258.
- S.G. Abdullaeva, N.T. Mamedov y G.S. Orudzhev, *Phys. Stat.* Sol. (b) **119** (1983) 41.
- S.G. Abdullaeva y N.T. Mamedov, Phys. Stat. Sol. (b) 133 (1986) 171.
- 21. S. Kashida, Y. Yanadori, Y. Otaki, Y. Seki y A.M. Panich, *Phys. Stat. Sol.* (a) **203** (2006) 2666.
- 22. V. Grivickas, V. Bikbajevas y P. Grivickas, *Phys. Stat. Sol (b)* 243 (2006) R31.
- K.R. Allakhverdiev, T.G. Mamedov, V.V. Panfil v, M.M. Shukyurov y S.I.Subbotin, *Phys. Stat. Sol.* (b) 131 (1985) K23.
- 24. Dzhavadov, Phys. Stat. Sol. (b) 137 (1986) 21.
- 25. G.D. Guseinov et al., Sov. Phys. Semicond. 19 (1985) 545.
- 26. R. Letoullec, J.P. Pinceaux y P. Loubeyre, *High Pressure Research* **1** (1988) 77.
- N. Kalkan, J.A. Kalomiros, M. Hanias y A.N. Anagnostopolous, Sol. Stat. Comm. 99 (1996) 375.
- J.C. Chervin, B. Canny, J.M. Besson y Ph. Pruzan, *Rev. Sci. Instrum.* 66 (1995) 2595.
- 29. A. Jayaraman, Rev. Sci Instrum. 57 (1986) 1013.
- J. González, F.V. Pérez, E. Moya y J. Chervin, J. Phys. Chem. Solids 56 (1995) 335.
- 31. J. R. Elliot, Phys. Rev. 108 (1957) 1384.

- 32. Y. Toyozawa, Prog. Theor. Phys. 20 (1958) 53.
- 33. J. Pellicer et al., Phys. Rev. B. 60 (1999) 8871.
- 34. J.M. Besson, K.P. Jain y A. Kuhn, *Phys. Rev. Lett.* **32** (1974) 936.
- 35. M. Gauthier, A. Polian, J.M. Besson y A. Chevy, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 3837.
- 36. F.J. Manjón et al., Phys. Rev. B 63 (2001) 125330.
- N. Kuroda, O. Ueno y Y. Nishina, J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 581.
- D. Errandonea, F.J. Manjón, J. Pellicer, A. Segura y V. Muñoz, *Phys. Stat. Sol. (b)* **211** (1999) 201.
- O. Contreras, Ch. Power, J.C. Chervin y J. González, *Rev. Mex. Fís.* **49** (2003) 186.