

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СМЕЩЕНИЯ КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ В $CdGa_2Se_4$

Т.Г. КЕРИМОВА, Ш.С. МАМЕДОВ, И.А. МАМЕДОВА, Р.А. ГУЛИЕВ

Институт Физики АН Азербайджана

Баку, 370143, пр. Г. Джавида 33

Использован метод Manoogian-Leclerc для описания температурной зависимости края поглощения в $CdGa_2Se_4$. Оценены вклады в температурный коэффициент края поглощения от электрон-фононного взаимодействия и расширения решетки. Вычислены деформационные потенциалы дна зоны проводимости и вершины валентной зоны.

Тройные полупроводниковые соединения $A^2B_2C_6$ (пр.гр. S_4^2) привлекают внимание исследователей в связи с возможностью создания на их основе полупроводниковых преобразователей [1]. Поэтому как теоретическое, так и экспериментальное исследование физических свойств этих соединений является актуальным. Одной из проблем при объяснении физических процессов, происходящих в полупроводниках, является отсутствие данных о значениях деформационных потенциалов для электронных состояний. Например, смещение дна зоны проводимости и вершины валентной зоны с температурой и давлением описываются деформационными потенциалами экстремумов зон. Поэтому определение деформационных потенциалов как из теоретических расчетов, так и из экспериментальных исследований (напр. зависимость смещения края поглощения с температурой, давлением и др.) являются актуальными.

В последнее время деформационные потенциалы краев зон определяют по методике Manoogian-Leclerc (M-L) [2] из температурной зависимости смещения края поглощения. Например, в [3] методом M-L [2] определены значения деформационных потенциалов для $AgInTe_2$.

В настоящей работе приводятся результаты определения значений деформационных потенциалов в $CdGa_2Se_4$ методом M-L [2] из температурной зависимости смещения края поглощения.

В [4] методом λ -модулированного отражения исследован край собственного поглощения $CdGa_2Se_4$ в интервале 90-300 К. Исследования проведены в неполяризованном излучении. Наблюдаемые особенности А и В при 2,713 эВ и 2,814 эВ, соответственно, авторами [4] идентифицированы как экситонные состояния. В [5] также исследован край собственного поглощения монокристаллов $CdGa_2Se_4$ и $CdGa_2Se_4:C_0^{2+}$ в интервале 19-290 К в неполяризованном излучении. В [6] отмечается, что температурная зависимость смещения края собственного поглощения в $CdGa_2Se_4$ и $CdGa_2Se_4:C_0^{2+}$ хорошо описывается соотношением Varshni [6].

В [7] нами проведены исследования температурной зависимости смещения края поглощения в $CdGa_2Se_4$ в интервале 5-300 К в поляризованном излучении. При этом наблюдалось нелинейное смещение края собственного поглощения в $CdGa_2Se_4$ как при $\vec{E} \parallel c$, так и при $\vec{E} \perp c$, где c - тетрагональная ось. Нелинейная за-

висимость смещения края собственного поглощения в $CdGa_2Se_4$ объясняется тем, что при низких температурах основным механизмом, ответственным за смещение является деформация решетки, а при высоких температурах - электрон-фононное взаимодействие.

Для определения значений деформационных потенциалов экстремумов зон в $\Gamma(000)$ мы использовали зависимость смещения края поглощения от температуры. Согласно [2] температурный коэффициент смещения края собственного поглощения в полупроводниках описывается следующим соотношением

$$E(0) - E(T) = UT^x + V\varphi[\coth\varphi/2T - 1] \quad (1)$$

где U , V , φ и x - параметры, не зависящие от температуры. В этом уравнении U описывает расширение решетки, V - электрон-фононное взаимодействие, φ - параметр имеющий размерность температуры. Поскольку в температурный коэффициент смещения края поглощения вносят вклад два фактора (расширение решетки и электрон-фононное взаимодействие), то эти части в рамках параметров M-L [2] можно представить в следующем виде:

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_1 = -\frac{V\varphi^2}{2T^2} \cos \operatorname{ech}^2(\varphi/2T) \quad (2)$$

и часть, описывающая расширение решетки

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_2 = -xUT^{x-1} \quad (3)$$

На рис.1 представлены температурная зависимость смещения края собственного поглощения в $CdGa_2Se_4$ (сплошная линия - расчет по M-L пунктирная-эксперимент), в интервале 5-300 К. Уравнение (1) подгонялось под экспериментальную зависимость $E-f(T)$ методом наименьших квадратов на ЭВМ. Значение x при этом было выбрано равным единице. Значения E_0 при $T=0$ были выбраны следующими: $(E_0)_{\parallel} = 2,353$ эВ, $(E_0)_{\perp} = 2,347$ эВ. Ниже приводятся значения для U , V , φ при $x=1$ для $\vec{E} \parallel c$ и $\vec{E} \perp c$. $\vec{E} \parallel c$ ($U = 1,55 \times 10^{-4}$ эВ/К, $V = 1,164 \times 10^{-4}$ эВ/К, $\varphi = 400$ К), $\vec{E} \perp c$ ($U = 1,841 \times 10^{-4}$ эВ/К, $V = 1,182 \times 10^{-4}$ эВ/К, $\varphi = 250$ К). В [4] проведена подгонка температур-

ной зависимости смещения особенностей А и В в CdGa₂Se₄ методом М-Л [2]. При подгонке для параметра

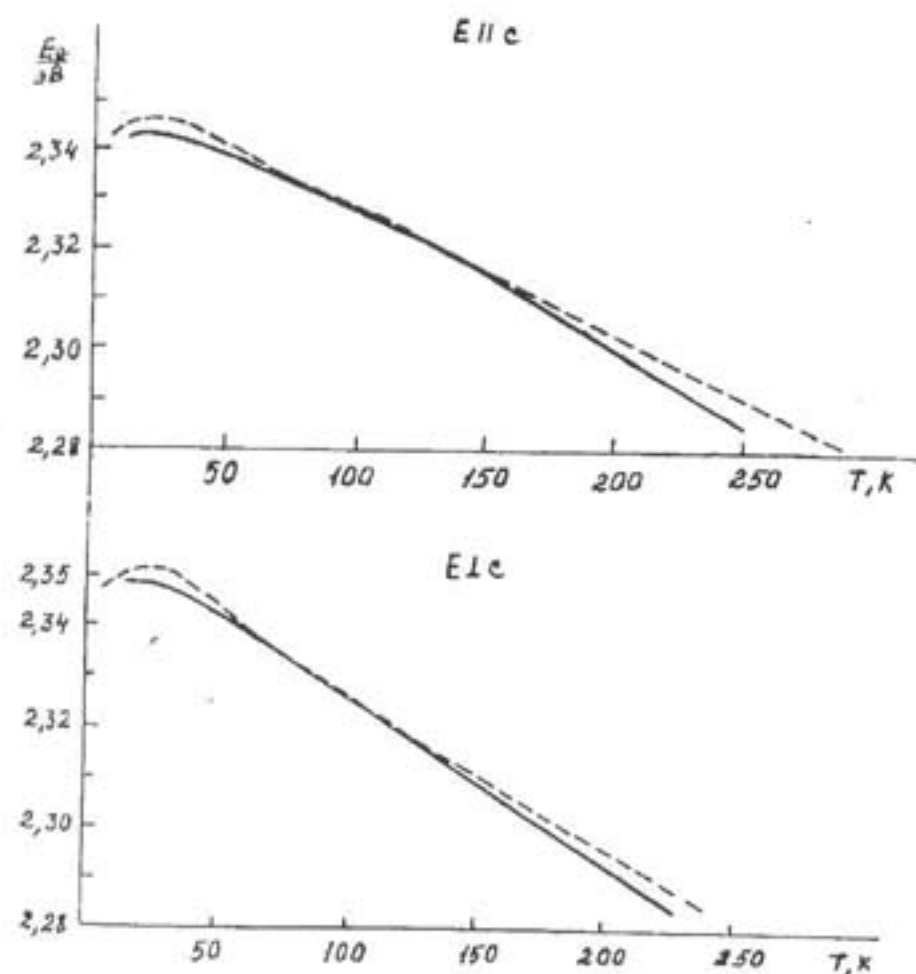


Рис. 1. Температурная зависимость смещения края собственного поглощения в CdGa₂Se₄ (сплошная линия - расчет по М-Л, пунктирная - эксперимент).

φ было получено значение 1005 К. Сами авторы отмечают, что значение этого параметра оказалось много выше, чем следует из оценок для средней оптической моды в CdGa₂Se₄.

Подставляем значения вышеуказанных параметров в (2) и (3) для $\left(\frac{dE}{dT}\right)_1$ и $\left(\frac{dE}{dT}\right)_2$ и получаем следующие значения:

$\left(\frac{dE}{dT}\right)_1^{ }$, эВ/К	$\left(\frac{dE}{dT}\right)_2^{ }$, эВ/К	$\left(\frac{dE}{dT}\right)_1^{\perp}$, эВ/К	$\left(\frac{dE}{dT}\right)_2^{\perp}$, эВ/К
$-2,55 \times 10^{-4}$	$-1,55 \times 10^{-4}$	$-2,283 \times 10^{-4}$	$-1,841 \times 10^{-4}$

Температурные коэффициенты смещения края собственного поглощения в линейной области (50÷300 К) для $\vec{E} || c$ $\left(\frac{dE}{dT}\right) = -2,55 \times 10^{-4}$ эВ/К, для $\vec{E} \perp c$ $\left(\frac{dE}{dT}\right) = -3,1 \times 10^{-4}$ эВ/К. Эти значения удовлетворительно согласуются с вычисленными значениями при $\vec{E} || c$ $\left(\frac{dE}{dT}\right)_1 + \left(\frac{dE}{dT}\right)_2 = -4,1 \times 10^{-4}$ эВ/К и $\vec{E} \perp c$ $\left(\frac{dE}{dT}\right)_1 + \left(\frac{dE}{dT}\right)_2 = -4,124 \times 10^{-4}$ эВ/К. По известным $\left(\frac{dE}{dT}\right)_1$ и $\left(\frac{dE}{dT}\right)_2$ можно вычислить значения деформационных потенциалов для экстремумов

зон. Согласно [8], часть, описывающая электрон-фононное взаимодействие имеет следующий вид

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_1 = \frac{8}{9\pi} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \left(\frac{K_B \cdot \Omega}{\hbar M V^2}\right) (m_e c_e^2 + m_h c_h^2) \quad (4)$$

а в случае решеточного расширения

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_2 = 2\alpha_L (c_e + c_h) \quad (5)$$

В выражениях (4) и (5) $M = 18,84 \times 10^{-22}$ г, $\Omega = 3,34 \times 10^{-22}$ см³ масса и объем элементарной ячейки, соответственно, V - скорость звука в материале $V = (K_B \theta_D / \hbar) (\Omega_1 / 6\pi^2)^{1/3}$, θ_D - температура Дебая. В [9] приводятся значения для θ_D равные 193 К и 115 К вдоль и перпендикулярно оси роста кристалла. При вычислениях мы использовали среднее значение $\theta_D = 150$ К. $\Omega_1 = 2,38 \times 10^{-23}$ см³ - объем приходящийся на один атом. Для значений эффективных масс m_e и m_h были использованы данные из [10]. $m_e^* = \left(\left(m_e^{\perp}\right)^2 \cdot m_e^{||}\right)^{1/3}$, $m_h^* = \left(\left(m_h^{\perp}\right)^2 \cdot m_h^{||}\right)^{1/3}$ ($m_e^{||} = 0,162 m_0$, $m_h^{||} = 0,264 m_0$, $m_e^{\perp} = 0,17 m_0$, $m_h^{\perp} = 0,909 m_0$).

Эти данные относятся к состояниям Γ_2^V и Γ_1^C , вершины валентной зоны и дна зоны проводимости, соответственно, (рис.2). Зная Ω и θ , было вычислено $V = 1,43 \times 10^5$ см/с. При вычислениях коэффициента термического расширения решетки $\alpha_L = (2\alpha_a + \alpha_c) / 3 = 13,2 \times 10^{-6}$ К⁻¹, значения $\alpha_a = 13 \times 10^{-6}$ К⁻¹ и $\alpha_c = 10,5 \times 10^{-6}$ К⁻¹ были взяты из [11]. Решая систему уравнений (4) и (5) для деформационных потенциалов были получены следующие пары значений: $c_{e1} = -11,2$, $c_{h1} = 4,79$, $c_{e2} = 1,22$, $c_{h2} = -7,6$ эВ. Согласно [12], необходимо выполнение условия $|c_e| > |c_h|$, поэтому выбрана следующая пара значений: $c_e = -11,2$ и $c_h = 4,79$ эВ. Из-за отсутствия данных для эффективных масс для состояния $(\Gamma_3 + \Gamma_4)^V$ не удалось оценить значение деформационного потенциала для $(\Gamma_3 + \Gamma_4)^V$.

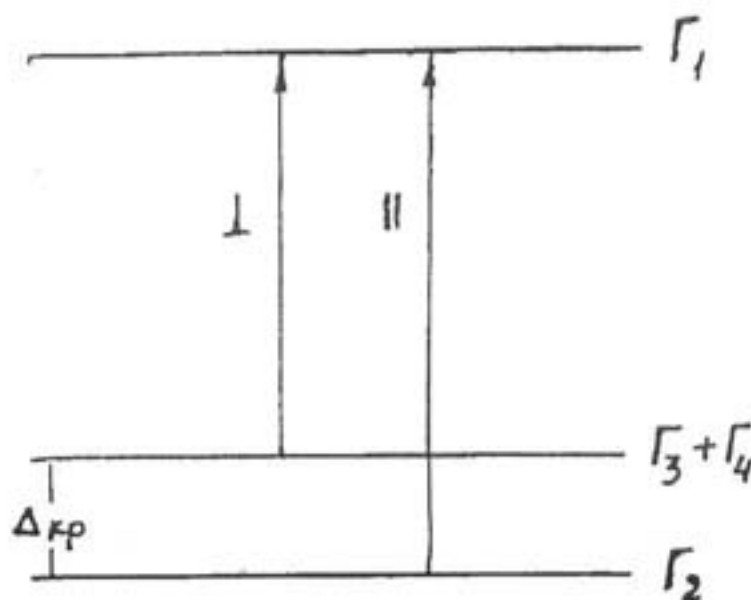


Рис. 2. Оптические переходы в центре зоны Бриллюэна в CdGa₂Se₄.

- [1] *A.N. Георгобидани, С.И. Радауцан, И.М. Тугиняну.* ФТП, 1985, т. 12, в. 2, с.193-212.
- [2] *A. Manoogian and A. Laclerc.* Phys. Stat. Sol. (b), 92, K.23 (1979).
- [3] *M.Quintero, R. Tovar, C. Bellabarba and J.C. Wooley.* Phys. Stat. Sol. (b), 162, 517 (1990).
- [4] *R. Bacewicz.* Phys.Stat. Sol. (b) 122, K155 (1984).
- [5] *Chang-Dae Kim, Tong-San Cho, Wha-Tek Kim and Hong-Lee Park.* Solid State Communications, v. 63, № 9, pp. 871-872 (1987).
- [6] *V.P. Varshni.* Physica 34, 149, (1967).
- [7] *T.G. Керимова, Ш.С. Мамедов, И.А. Мамедова.* Неорг. матер., 1993, т. 29, № 7, с. 902-904.
- [8] *H.Y. Fan.* Phys. Rev. 82, 900 (1951).
- [9] *Б.Хусейнов, Ш.Мавлонов, Б.С. Умаров.* Неорг. матер., 1978, т. 14, в. 5, с. 863-866.
- [10] *V.J. Chizhikov, V.L. Paniyutin, B.E. Ponedelnikov, A.E. Rozenson.* J. Physique 42, 1003-1006 (1981).
- [11] *Г.Ф. Мочарнюк, Т.И. Бабюк, Л.С. Лазаренко, М.М. Маркус, С.И. Радауцан.* Физ. электроника, Львов, Вища школа, 1977, в. 1, с. 64-68.
- [12] *C. Rincon.* J. Phys. Chem. Solid, 49, 391 (1988).

T.G. Kerimova, Sh.S. Mamedov, I.A. Mamedova, R.A. Guliyev

$CdGa_2Se_4$ -DƏ UDULMA SƏRHƏDDİNİN TEMPERATUR ASILILIĞI VƏ DEFORMASIYA POTENSİALLARI

$CdGa_2Se_4$ -də udulma sərhəddinin temperatur asılılığını təsvir etmək üçün Manoogian-Leklerk metodundan istifadə edilmişdir. Temperatur əmsallarını təşkil edən hissələr təyin edilmişdir. Keçirici zonanın dibi və valent zonasının maksimumu üçün deformasiya potensialları hesablanmışdır.

T.G. Kerimova, Sh.S. Mamedov, I.A. Mamedova, R.A. Guliyev

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE SHIFT OF THE ABSORPTION EDGE AND DEFORMATION POTENTIALS IN $CdGa_2Se_4$

The method of Manoogian-Leclerc have been used for the describing of the temperature dependence of the shift of the absorption edge in $CdGa_2Se_4$. The contributions for the temperature coefficient of the shift of the absorption edge are evaluated. The deformation potentials of the conduction band bottom and the top of the valence band are calculated.

Дата поступления: 08.12.97

Редактор: Б.Г. Тазиев