

Влияние температуры на электронные спектры в области края собственного поглощения CdGa_2Se_4

© Т.Г. Керимова[†], Р.А. Гулиев

Институт физики Академии наук Азербайджана,
AZ-1143 Баку, Азербайджан

(Получена 19 августа 2010 г. Принята к печати 14 сентября 2010 г.)

Приводятся результаты исследования температурной зависимости коэффициента поглощения CdGa_2Se_4 в поляризованном излучении в интервале 5–300 К и интенсивности излучения при 4.2–77 К. Наблюдаемые изменения поляризационной зависимости коэффициента поглощения и интенсивности излучения с понижением температуры объясняются различной скоростью движения состояний вершины валентной зоны $\Gamma_3 + \Gamma_4$ и Γ_2 при изменениях тетрагонального сжатия.

Полупроводниковые соединения $A^{\text{II}}B_2^{\text{III}}C_4^{\text{VI}}$ (A —Cd, Zn, В—Ga, In, С—S, Se<Te) ввиду наличия в них значительной ширины запрещенной зоны, высокой фоточувствительности, яркой люминесценции представляют определенный интерес для полупроводникового приборостроения. На ряде этих соединений разработаны поверхностно-барьерные структуры и гетеропереходы для применения в качестве широкополосных фотодетекторов естественного излучения, фотопреобразователей естественного и линейно-поляризованного излучения [1–4].

Известно, что особенности физических свойств полупроводниковых соединений определяются особенностями их энергетического спектра. Поэтому исследование электронных спектров полупроводниковых соединений как теоретически, так и экспериментально является актуальной задачей физики твердого тела. Исследования влияния внешних воздействий (температура, давление и другие факторы) на электронные спектры позволяют получать дополнительную информацию об энергетическом спектре исследуемых соединений.

Впервые оптические спектры в области края собственного поглощения в поляризованном излучении в CdGa_2Se_4 были исследованы нами [5]. В результате анализа поляризационных зависимостей оптических спектров в области края собственного поглощения, теоретико-групповых исследований симметрии состояний, формирующих вершину валентной зоны и дно зоны проводимости в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна [6], и теоретических расчетов зонной структуры [7] была построена схема оптических переходов в $\Gamma(000)$ и установлены правила отбора для оптических переходов в CdGa_2Se_4 (рис. 1, а). В дипольном приближении вершина валентной зоны состоит из двух подзон $\Gamma_3 + \Gamma_4$ и Γ_2 , расщепленных кристаллическим полем, а дно зоны проводимости формируется состоянием Γ_1 .

В настоящем сообщении приводятся результаты исследования влияния температуры на электронные спектры в области края собственного поглощения CdGa_2Se_4 . С этой целью были исследованы спектры оптического

поглощения и фотолюминесценции в поляризованном излучении в интервале 4.2–300 К.

Для проведения оптических измерений были выращены монокристаллы CdGa_2Se_4 методом химических транспортных реакций. В качестве транспортера использовался кристаллический йод. Параметры решетки, определенные рентгенографическим методом на автодифрактометре типа Д8, $a = 5.57430 \text{ \AA}$, $c = 10.7560 \text{ \AA}$, $c/a = 1.873$ (пространственная группа S_4^2) согласуются с данными [2,8]. Совершенство монокристаллов контролировалось снятием лауэграмм. Выращенные монокристаллы имели вид трехгранных призм с естественными гранями $[\bar{1}12]$, $[1\bar{1}2]$ и $[001]$. Тетрагональная ось C с гранями $[\bar{1}12]$ и $[1\bar{1}2]$ составляет угол 37° . Измерения спектров поглощения и фотолюминесценции проводились на установках, собранных на базе SPM-2 и ДФС-12. В качестве источника возбуждения использовался лазер ЛПМ-11 ($\lambda = 4416 \text{ \AA}$), а в качестве источника излучения лампа накаливания. Регистрация сигнала осуществлялась фотоэлектрическим методом с использованием системы синхронного детектирования.

1. Обсуждения результатов

На рис. 1 представлена зависимость смещения края собственного поглощения CdGa_2Se_4 от температуры в поляризованном излучении. В интервале 5–300 К зависимость смещения края поглощения от температуры носит нелинейный характер. Скорость смещения края в интервале 70–300 К $(dE/dT)_I = -6.2 \cdot 10^{-4} \text{ эВ/град}$, $(dE/dT)_I = -6 \cdot 10^{-4} \text{ эВ/град}$. При температуре $\sim 70 \text{ К}$ наблюдается пересечение зависимостей $K \approx f(h\nu)$ для $E \parallel C$ и $E \perp C$.

В области температур 5–40 К температурные коэффициенты смещения края собственного поглощения принимают положительные значения, причем коэффициент поглощения в поляризации $E \parallel C$ больше, чем в поляризации $E \perp C$.

Известно, что в температурный коэффициент смещения ширины запрещенной зоны вносят вклад два фактора — электрон-фононное взаимодействие и деформация решетки. В интервале температур 80–300 К основной

[†] E-mail: ktaira@physics.ab.az

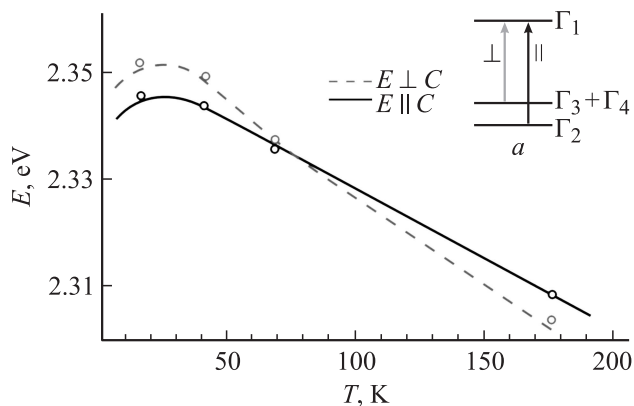


Рис. 1. Зависимость смещения ширины запрещенной зоны от температуры в CdGa_2Se_4 . *a* — схема оптических переходов в $\Gamma(000)$ зоны Бриллюэна.

вклад в температурный коэффициент ширины запрещенной зоны вносит электрон-фононное взаимодействие, а в области 5–40 К основной вклад вносит деформация решетки.

На рис. 2 представлены спектры фотолюминесценции CdGa_2Se_4 при 77 и 4,2 К. Поляризационная зависимость интенсивности излучения повторяет поляризационную зависимость коэффициента поглощения при температурах выше и ниже 70 К.

Наблюдаемые температурные зависимости оптического поглощения и краевого излучения в интервале 4,2–300 К свидетельствуют об изменениях, происходящих в электронных спектрах CdGa_2Se_4 .

Отсутствие особенностей в зависимости теплоемкости от температуры [9] и мягкой моды в спектрах комбинационного рассеяния свидетельствуют о том, что наблюдаемые изменения в оптических спектрах невозможно объяснить структурными фазовыми переходами. Однако изменение поляризационной зависимости спектров поглощения и фотолюминесценции можно объяснить исходя из структуры электронных спектров, формирующих вершину валентной зоны и дно зоны проводимости. В дипольном приближении вершина валентной зоны CdGa_2Se_4 состоит из двух подзон, Γ_2 и $\Gamma_3 + \Gamma_4$, расстояние между которыми определяется кристаллическим расщеплением ($\Delta_{\text{кр}}$). Кристаллическое расщепление в CdGa_2Se_4 обусловлено разностью псевдопотенциалов атомов катионной подрешетки и тетрагональным сжатием решетки вдоль оси *C*. Поэтому было предположено, что с уменьшением температуры от 300 до 4,2 К из-за деформации решетки изменяются параметры *a* и *c*, приводя к изменению тетрагонального сжатия ($2 - \frac{c}{a}$), которое может привести к перестройке электронного спектра. В результате сжатия решетки вдоль оси *C* имеют место искажения в первой координационной сфере, которые не приводят к изменению симметрии решетки, а изменяют межатомные связи и валентные углы. Поэтому изменение параметров решетки

можно рассматривать как дополнительное возмущение в энергетическом спектре.

Для проверки этих предположений были проведены расчеты энергетического положения зоны Бриллюэна $\Gamma(000)$, $N(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ и $T(001)$ в зависимости от величины сжатия решетки. Расчеты были проведены методом псевдопотенциала. Оказалось, что дно зоны проводимости в точках $\Gamma(000)$, $N(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ и $T(001)$ и

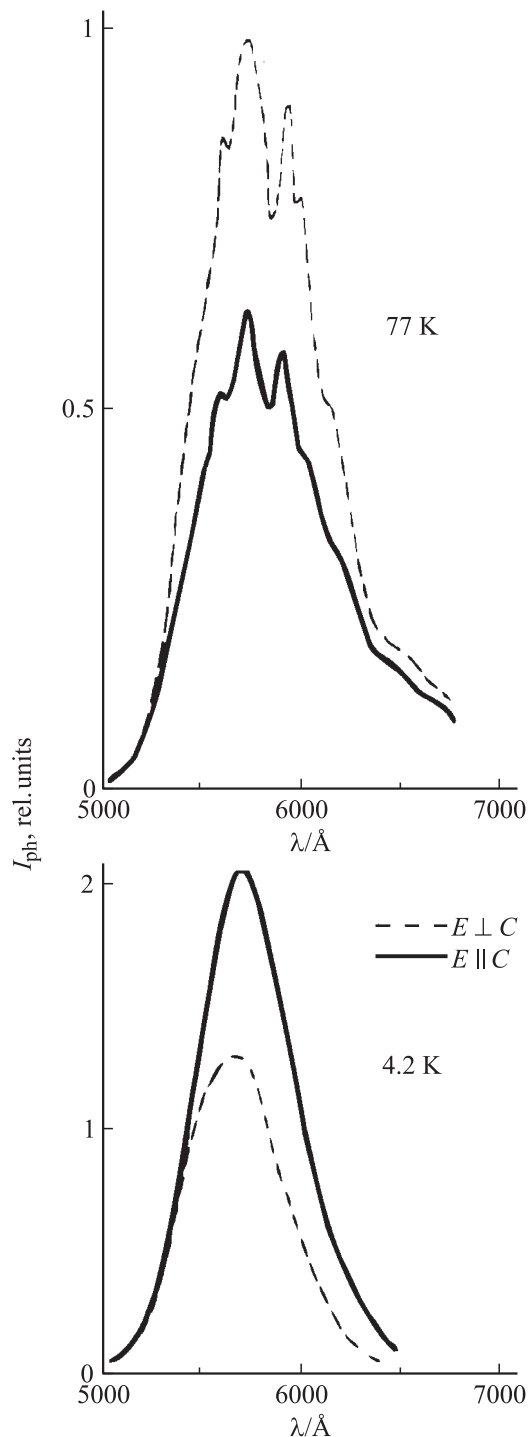


Рис. 2. Спектральная зависимость интенсивности излучения в CdGa_2Se_4 при 77 и 5 К.

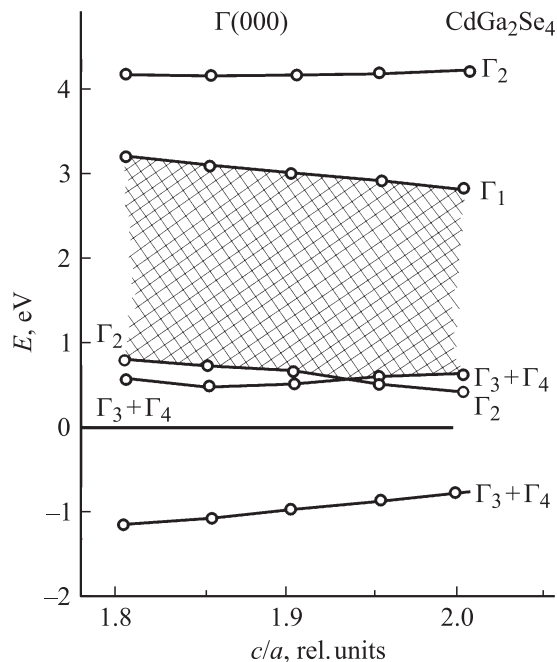


Рис. 3. Зависимость энергетического положения состояний вершины валентной зоны и зоны проводимости в $\Gamma(000)$ зоны Бриллюэна от величины тетрагонального сжатия $(2 - \frac{c}{a})$.

вершина валентной зоны в точках $N(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ и $T(001)$ слабо зависят от параметра $\frac{c}{a}$. Наибольшие изменения наблюдаются для состояний, формирующих вершину валентной зоны в $\Gamma(000)$ (рис. 3). Двукратно-вырожденный уровень $\Gamma_3 + \Gamma_4$ при увеличении сжатия решетки смещается вниз, а невырожденный уровень Γ_2 вверх по шкале энергий. Следовательно, деформационные потенциалы состояний Γ_2 и $\Gamma_3 + \Gamma_4$ различаются по величине и знаку. Исходя из вышеизложенного можно сделать вывод о том, что при температурах выше и ниже 70 К верхний уровень валентной зоны формируется состояниями $\Gamma_3 + \Gamma_4$ и Γ_2 соответственно.

Список литературы

- [1] А.А. Вайполин, Ю.А. Николаев, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, И.Е. Теруков. ФТП, **37** (4), 432 (2003).
- [2] А.А. Вайполин, Ю.А. Николаев, И.К. Полушина, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, И.Е. Теруков, N. Fernelius. ФТП, **37** (5), 572 (2003).
- [3] А.А. Вайполин, Ю.А. Николаев, И.К. Полушина, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, И.Е. Теруков. ФТП, **37** (4), 432 (2003).
- [4] В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, А.А. Вайполин, И.В. Бондарь, N. Fernelius. ФТП, **37** (11), 1321 (2003).
- [5] Т.Г. Керимова, Ш.С. Мамедов, Н.М. Мехтиев, Р.Х. Нани. ФТП, **13** (3), 494 (1979).
- [6] Д.А. Гусейнова, Т.Г. Керимова, Р.Х. Нани. ФТП, **11** (6), 1135 (1977).
- [7] В.Л. Панютин, Б.Э. Понедельников, Р.Э. Розенсон, В.И. Чижиков. Изв. вузов. Физика, **57** (1979).

- [8] H. Hahn, G. Frank, W. Klinger, A. Stöerger, S. Stöerger. Zeitschrift für anorganische allgemeine Chemie, **279**, 241 (1955).
- [9] K.K.Mamedov, M.M. Aliev, I.G. Kerimov, R.Kh. Nani. Phys. Status Solidi A, **9** (2) K149 (1972).

Редактор Л.В. Беляков

Influence of temperature on electron spectra of CdGa_2Se_4

T.G. Kerimova, R.A. Guliyev

Physics Institute, Academy of Sciences of Azerbaijan, AZ-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract Results of investigation of the temperature dependence of energy of band gap CdGa_2Se_4 in polarized light in temperature region of 5–300 K and intensity of radiation in 4.2–77 K are present. Observed changes of polarized dependence of absorption coefficient and intensity of radiation with decrease of temperature are explained by difference of velocity of motion of states of the valence band top $\Gamma_3 + \Gamma_4$ and Γ_2 in changes of tetragonal distortion.