

ОПТИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ ДВУИОДИСТОГО ОЛОВА НА КРАЮ ОСНОВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

М. Т. Костышин, В. С. Костко, И. З. Индутный и В. М. Косарев

Характерной особенностью двуиодистого олова (SnJ_2) является его высокая светочувствительность, что позволяет использовать его в качестве фоторегистрирующей среды. В связи с этим особый интерес представляет исследование оптических свойств тонких пленок SnJ_2 . Отсутствие в литературе каких-либо данных по оптическим постоянным SnJ_2 стимулировало авторов предпринять попытку восполнить этот пробел.

Целью настоящей работы было, используя результаты проведенного анализа формы экситонной полосы, определить из спектра поглощения SnJ_2 такие важные характеристики твердого тела, как ширину запрещенной зоны, энергию связи экситона при низкой и комнатной температурах.

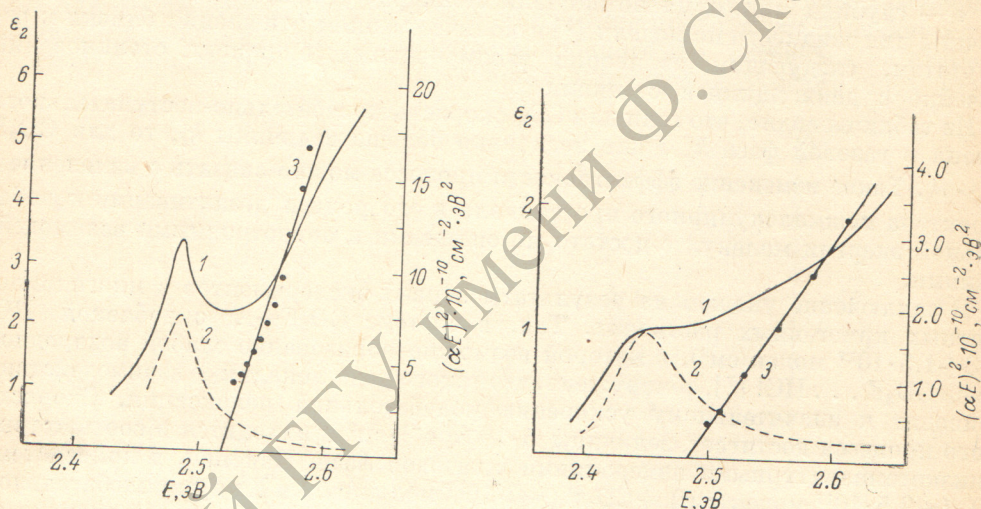


Рис. 1.

1 — спектральная зависимость мнимой части диэлектрической постоянной ϵ_2 слоев SnJ_2 ($T=85$ К) на краю основного поглощения; 2 — свертка гауссиана и асимметричного лорентциана; 3 — зависимость $(\alpha E)^2$ от E (без учета экситонного поглощения).

Рис. 2.

1 — спектральная зависимость мнимой части диэлектрической постоянной ϵ_2 слоев SnJ_2 ($T=293$ К) на краю основного поглощения; 2 — свертка гауссиана и асимметричного лорентциана; 3 — зависимость $(\alpha E)^2$ от E (без учета экситонного поглощения).

Измерения проводились при температурах 85 и 293 К на клинообразных слоях двуиодистого олова, напыленных на стеклянные подложки в вакууме $\sim 10^{-5}$ мм рт. ст. В измерениях использовались образцы, толщины которых изменялись линейно от 0 до 240 нм. Показатели преломления n и поглощения κ измерялись одновременно интерференционным методом [1]. Результаты измерений выражены через действительную и мнимую части комплексной диэлектрической постоянной ϵ_1 и ϵ_2 .

На рис. 1 и 2 приведены спектры мнимой части комплексной диэлектрической постоянной двуиодистого олова при температурах 85 и 293 К в области энергий, прилежащих к краю основного поглощения. На краю поглощения отчетливо выделяется экситонный пик, интенсивность которого существенно зависит от температуры и увеличивается с ее понижением. С повышением температуры экситонная полоса (2.48 эВ при 85 К) сдвигается в длинноволновую сторону, причем термический коэффициент сдвига (в предположении, что сдвиг происходит линейно) равен $-1.44 \cdot 10^{-4}$ эВ/К. Изменяется и полуширина экситонной линии. Так, при 85 К она равна 0.036 эВ, а при температуре 293 К — 0.07 эВ.

Для количественного определения параметров энергетической структуры полупроводника необходимо проанализировать его спектр поглощения. Энергетические уровни экситона в запрещенной зоне приводят к существенному изменению характера края основного поглощения. Поэтому положение и форму края полосы основного поглощения можно определить, исключив при этом вклад экситонной полосы.

Анализ формы экситонной полосы SnJ_2 указал на наличие достаточно сильного экситон-фононного взаимодействия. Спектральная зависимость ϵ_1 описывается сверткой асимметричного лоренциана и гауссиана, аналитическое выражение которой для ϵ_2 имеет следующий вид [2]:

$$\epsilon_2 = F \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha + 2A(v-y)}{(v-y)^2 + \alpha^2} e^{-y^2} dy. \quad (1)$$

где $\alpha = H_x \sqrt{\ln 2} / H_r$, $v = (E - E_0) 2 \sqrt{\ln 2} / H_r$, H_r и H_x — полуширины гауссовой и лоренцевой составляющих, ϵ_{10} — вклад других полос, величина F пропорциональна силе осциллятора перехода f и концентрации элементарных ячеек, A — степень асимметрии, $E_0 = E_{0\lambda} + \Delta_{0\lambda}$ — положение экситонного уровня, смещенного на $\Delta_{0\lambda}$ вследствие экситон-фононного взаимодействия. Используя соотношение (1), с константами, определенными из анализа экситонной полосы по $\epsilon_1(E)$, можно аппроксимировать экситонный контур поглощения на спектральной зависимости ϵ_2 сверткой асимметричного лоренциана и гауссиана. Вычтя последний из значений $\epsilon_2(E)$, полученных экспериментально, получим результирующие кривые $\epsilon_2(E)$ уже без учета влияния экситонных полос.

Если минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны расположены в одной и той же точке k -пространства, то электромагнитное излучение может вызвать прямые переходы электронов из одной зоны в другую, происходящие с поглощением фотона и почти без изменения квазиимпульса электрона. Если при этом матричный элемент оператора импульса по волновым функциям, соответствующим краям электронной и дырочной зон, отличен от нуля, что соответствует разрешенным переходам, то зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона вблизи края должна выражаться формулой

$$\frac{\alpha}{E} \sim \frac{(E - E_g)^{1/2}}{E}, \quad (2)$$

иначе

$$(\alpha E)^2 \sim (E - E_g). \quad (3)$$

Такая запись наиболее удобна при количественной обработке экспериментальных результатов, поскольку, если на осях отложить $(\alpha E)^2$ и E , то экспериментальные точки должны образовать прямую линию. На рис. 1 и 2 (кривые 3) приведены экспериментальные зависимости $(\alpha E)^2$ от E без учета экситонного поглощения. В области прилежащей к краю поглощения экспериментальные точки неплохо укладываются на прямую линию. Это свидетельствует о том, что край собственного поглощения в SnJ_2 обусловлен прямыми разрешенными переходами. Точка пересечения прямой с осью энергий определяет ширину запрещенной зоны E_g . При температуре 85 К $E_g = 2.52$ эВ. Зная положение экситонной полосы и края собственного поглощения, можно определить энергию связи экситона. Ее значение при 85 К равно (0.039 ± 0.005) эВ. Из рис. 2 видно, что с повышением температуры край собственного поглощения сдвигается в длинноволновую область спектра и при 293 К ширина запрещенной зоны равна 2.49 эВ. Считая, что сдвиг происходит линейно, для коэффициента термического сдвига края междужонных переходов получим значение $\Delta E / \Delta T = -1.58 \cdot 10^{-4}$ эВ/К, близкое к коэффициенту термического сдвига экситонной полосы $(-1.44 \cdot 10^{-4}$ эВ/К). Отсюда следует, что энергия связи экситона практически не меняется с температурой.

В заключение отметим, что детальное исследование края основного поглощения, по данным спектральной зависимости мнимой части диэлектрической постоянной ϵ_2 , позволило получить информацию о ширине запрещенной зоны,

величине энергии связи экситона при 85 и 293 К, коэффициентах термического сдвига экситонной линии и края междузонных переходов, а также сделать следующие выводы о характере зонной структуры SnJ_2 :

- 1) минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны находятся в одной точке зоны Бриллюэна;
- 2) матричный элемент оператора импульса по состояниям, соответствующим краям зон, отличен от нуля.

Литература

- [1] М. Т. Костышин. Вестн. КГУ, 2, 17, 1959.
 [2] И. З. Индутьный. Автореф. канд. дисс., Киев, 1979.

Поступило в Редакцию 27 мая 1981 г.

УДК 539.134+539.194.01

УТОЧНЕННЫЙ ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С ЯДРАМИ В АТОМАХ И МОЛЕКУЛАХ

Н. Н. Пенкина, Т. К. Ребане и В. И. Устимов

Энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядром в атоме или молекуле равна

$$-\sum_{j=1}^N \left\langle \frac{1}{r_j} \right\rangle = \frac{\partial E(Z, N)}{\partial Z}, \quad (1)$$

где $\partial E/\partial Z$ — частная производная от энергии по заряду данного ядра при фиксированном числе электронов N , которая с высокой точностью может быть вычислена интерполяцией экспериментальных энергий изоэлектронных систем. Такой метод использовался в [1-4] для расчета электрон-ядерных взаимодействий и постоянных ядерного диамагнитного экранирования в атомах и молекулах; он позволяет учитывать эффекты электронной корреляции, не требуя каких-либо сведений о волновых функциях. В случаях, когда данные об энергиях изоэлектронных систем недостаточно полны, приходится рассматривать системы с переменным числом электронов. Формула (1) заменяется тогда формулой

$$-\sum_{j=1}^N \left\langle \frac{1}{r_j} \right\rangle = \frac{\partial E(Z, N)}{\partial Z} = \frac{dE}{dZ} - \frac{\partial E(Z, N)}{\partial N} \frac{dN}{dZ}. \quad (2)$$

Для систем с фиксируемой кратностью ионизации $q = Z - N$ имеем $dN/dZ = 1$, а dE/dZ представляет собой производную по Z от функции $f(Z) = E(Z, Z - q)$.

Анализ, проведенный одним из авторов [5] с помощью метода вторичного квантования, показал, что производные $\partial E/\partial N$ и dE/dZ претерпевают при целочисленных значениях $N = \nu$ скачки непрерывности, равные $I_\nu - A_\nu$, где I_ν и A_ν — энергии ионизации и электронного сродства ν -электронной системы с суммарным зарядом q . Для производной dE/dZ слева и справа от точки $N = \nu$ справедливы равенства

$$\left. \frac{dE}{dZ} \right|_{N=\nu-0} = \frac{\partial E(Z, \nu)}{\partial Z} - I_\nu, \quad (3a)$$

$$\left. \frac{dE}{dZ} \right|_{N=\nu+0} = \frac{\partial E(Z, \nu)}{\partial Z} - A_\nu. \quad (3b)$$

Поэтому метод расчета энергий электрон-ядерного взаимодействия по формуле (2) необходимо уточнить, отказавшись от обычно применяемой непре-