УДК 669.01+535.33

ПАРАМЕТРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ CdI2

1

Ю. М. Александров, Я. О. Довгий, И. В. Китык, В. Н. Колобанов, В. Н. Махов, В. В. Михайлии

(кафедра теоретической физики)

Кристаллы CdI₂ являются широкозонными слоистыми кристаллами. Наиболее распространенной их модификацией является политип 4H (обозначения по Рамсделлу) с пространственной группой симметрии C^4_{6v} , причем точечная группа слоя имеет симметрию D_{3d} . В работе [1] проводился расчет зонной структуры методом сильной связи. На основании этих расчетов с учетом экспериментально полученных спектров отражения в области до 10,5 эВ была построена количественная зонная энергетическая структура этих кристаллов [2]. Недостатком проведенных исследований является ограниченность спектрального интервала отражения и пренебрежение эффектами спин-орбитального взаимодействия.

Исследуемые монокристаллы выращивались методом Бриджмена—Стокбаргера с предварительной 45-кратной зонной очисткой. С целью предотвращения фоторазложения рост проводился в затемненных кварцевых тиглях. Выращенные монокристаллы имели диаметр около 1,5 см и высоту до 1 см. Хорошая спайность перпендикулярно оптической оси (параллельно слоям) давала возможность скалывать зеркальные поверхности высокого качества, не требующие дополнительной обработки. Для измерений отражения были использованы сколы, имеющие размеры 1,2×1,0 см.

Нами проводились измерения коэффициента отражения R(E) скола монокристалла CdI₂ при падении света на образец, близком к нормальному (около 10°), при комнатной температуре и температуре жидкого азота. В области энергий 3—6 эВ измерялись абсолютные значения коэффициента отражения на установке, смонтированной на базе спектрофотометра CФ-4. В интервале 5—20 эВ измерялось относительное отражение скола кристалла CdI₂ с помощью синхротронного излучения ускорителя C-60 ФИАН СССР [3]. В эксперименте использовалась установка на базе монохроматора по модифицированной схеме Водсворта без входной щели, имеющего разрешение не хуже 10 А в спектральной области 400—2400 Å. В интервале 5—6 эВ проводилась сшивка результатов на этих установках.

На рис. 1 приведены спектры отражения CdI_2 , полученные при комнатной и азотной температурах. При энергиях квантов, превышающих ширину запрещенной зоны $E_g=3,48$ эВ [4], наблюдается резкая структура спектров отражения, соответствующая межзонным и экситонным переходам. Согласно критерию температурных зависимостей сил осцилляторов [5], можно выделить пики, соответствующие глубинным экситонам при энергиях квантов 5,57 и 6,12 эВ.

На основании экспериментально полученных данных с помощью соотношений Крамерса—Кронига проводились расчеты оптических функций CdI₂. Расчеты проводились по методике, описанной в [6]. Значения действительной ε_1 и мнимой ε_2 частей диэлектрической проницаемости представлены на рис. 2. Расчеты приведены для температуры T = 77 К.

Для идентификации электронного спектра проводились расчеты параметров энергетических зон методом нелокального псевдопотенциала, подробно описанным в [7]. Для получения собственных значений в 48 различных точках зоны Бриллюэна решался детерминант вида

$$\left\| \left(\frac{h^2 k^2}{2m} - E \right) \delta_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{q}} + \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | V | \mathbf{k} \rangle S(\mathbf{q}) \right\| = 0, \qquad (1)$$

где S(q) — структурный фактор. При этом атомный формфактор представлял собой суперпозицию атомных формфакторов отдельных атомов, определявшихся по соотношению



Рис. 1. Спектральная зависимость коэффициента отражения CdI₂ при комнатной температуре (пунктирная кривая) и температуре жидкого азота (сплошная кривая)



Рис. 2. Спектральная зависимость действительной є₁ и мнимой є₂ частей диэлектрической проницаемости CdI₃ при температуре жидкого азота



Рис. 3. Зона Бриллюэна кристалла CdI2

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | V | \mathbf{k} \rangle = \frac{4\pi}{\Omega_0} \int_0^r dr \cdot r^2 J_i \left(|\mathbf{k}| r \right) J_i \left(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| r \right) V(r) P_i(\cos \theta) \left(2l + 1 \right), (2)$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки, J_l — функция Бесселя, P_l — полиномы Лежандра, θ — угол между векторами **k** и **k**+**q**.

Расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1045. Хорошая сходимость собственных значений энергии достигалась при размерах детерминанта порядка 130×130.

Используя теоретико-групповые правила отбора и условия совместности наряду с полученными из эксперимента максимумами $\epsilon_2(E)$, удалось построить количественную зонную схему кристаллов Cdl₂ с учетом эффектов спин-орбитального взаимодействия, представленную на рис. 3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Robertson J. J. Phys. C, 1979, 12, р. 4753. [2] Довгий Я. О., Китык И. В. Укр. физ. журн., 1984, 29, с. 884. [3] Александров Ю. М. и др. Препринт ФИАН СССР № 164. М., 1979. [4] Довгий Я. О., Пидзырайло Н. С., Брилинский М. И., Кудрявец С. П. Укр. физ. журн., 1969, 14, с. 1805. [5] Субашиев В. К., Ле Хан Бин. Письма в ЖЭТФ, 1970, 12, с. 139. [6] Довгий Я. О., Китык И. В., Рудь Н. А. Изв. АН СССР. Неорган. мат., 1984, 49, с. 353. [7] Bachelet G. B., Haman D. R., Schluter M. Phys. Rev., 1982, 26B, p. 4199.

Поступила в редакцию 14.11.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, Т. 26, № 3

УДК 621.315.592

О ТЕМПЕРАТУРНОМ ГАШЕНИИ ФОТОПРОВОДИМОСТИ В НЕЛЕГИРОВАННЫХ ПЛЕНКАХ a-St: H

И. А. Курова, Н. Н. Ормонт, В. Д. Подругина, К. Б. Читая

(кафедра физики полупроводников)

Температурное гашение межзонной фотопроводимости ($T\Gamma M\Phi$) в нелегированных пленках a-Si: Н наблюдалось в ряде работ [1-6]. С учетом того, что межзонная фотопроводимость определяется неравновесными электронами, подвижность которых намного больше подвижности дырок, $T\Gamma M\Phi$ в ранних работах [1-4] интерпретировалось в рамках модели Роуза [7]. Предполагалось, что в запрещенной зоне a-Si: Н имеются по крайней мере два типа центров с разными сечениями захвата для электронов. При увеличении температуры происходит их перезарядка и электроны из зоны проводимости рекомбинируют на центрах с большим сечением захвата для электронов.

В работах [5, 6] предложена другая модель рекомбинации и возникновения ТГМФ в нелегированных пленках *a*-Si : Н с малой концентрацией оборванных связей. Она предполагает захват возбужденных электронов и дырок в «хвосты» плотности состояний соответствующих зон, туннелирование электронов на уровни нейтральных оборванных связей D^0 и затем межцентровую рекомбинацию электронов, находящихся на отрицательно заряженных центрах D^- , с дыркой, локализованной в «хвосте» плотности состояний валентной зоны. Активация дырки в валентную зону теплом или светом (соответственно