

ФІЗИКА І ТЕХНІКА НАПІВПРОВІДНИКІВ, МЕТАЛІВ, ДІЕЛЕКТРИКІВ ТА РІДКИХ КРИСТАЛІВ

УДК 539.1

Я.О. Довгий¹, Я.П. Кость¹, І.Г. Маньковська¹, І.М. Сольський²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра експериментальної фізики,

²Науково-виробниче підприємство “Карат”

ГІРОТРОПІЯ І ПАРАМЕТРИ ЦИРКУЛЯРНИХ ЕКСИТОНІВ У КРИСТАЛАХ α -TeO₂

© Довгий Я.О., Кость Я.П., Маньковська І.Г., Сольський І.М., 2007

Ya.O. Dovhyj, Ya.P. Kost', I.G. Man'kovska, I.M. Sol'skyj

GYROTROPY AND CIRCULAR EXCITONS PARAMETERS IN α -TeO₂ CRYSTALS

© Dovhyj Ya.O., Kost' Ya.P., Man'kovska I.G., Sol'skyj I.M., 2007

У структурі фундаментального спектра парателуриту виявлено екситонну смугу (А-смуга), відповідальну за дисперсію поворотної здатності в області прозорості та у прикордонній області спектра ($h\nu < E_g$). Визначено параметри гіроактивного осцилятора: енергію дисоціації $G_{ex} = 115$ меВ та екситонний радіус $r_{ex} = 8,0$ Å. Той факт, що r_{ex} виявився близьким до параметра ґратки c ланцюжкової структури TeO₂, вказує, що у парателуриті, вірогідно, маємо справу з екситонами проміжного радіуса.

In the structure of fundamental spectrum of paratellurite an exciton band (A-band) accountable for dispersion of optical rotation in the transparent region and in the region of absorption edge is fined ($h\nu < E_g$). The parameters of optically active oscillator are definite: dissociation energy $G_{ex} = 115$ meV and exciton radius $r_{ex} = 8,0$ Å. Circumstance that r_{ex} turned out near to the lattice parameter c of TeO₂ chain structure, indicates that in paratellurite, more reliable, we have dealing with excitons of intermediate radius.

1. Вступ

Монокристали парателуриту (TeO₂) проявляють сильну оптичну активність у напрямку оптичної осі. Відомо, що їхня гіротропія кристалічного походження, однак механізм явища досі не з'ясований. Для вирішення цієї проблеми необхідні детальні оптико-спектральні дослідження та розшифрування енергетичної структури кристала. З'ясування природи основного гіроактивного осцилятора TeO₂ та визначення його параметрів є основною метою цієї статті.

2. Методика досліджень

Дослідження проводилися на зразках різної товщини, вирізаних перпендикулярно до оптичної осі. Спектри поворотної здатності і крайового поглинання вимірювалися на автоматизованій спектрофотометричній установці (рис.1). Монокристали вирощені методом Чохральського. Усі досліджувані зразки були лівоповоротними. Точність вимірювання питомої поворотної здатності становила $\pm 2\%$, точність орієнтації зразків була не нижчою за $\pm 0,5^\circ$.

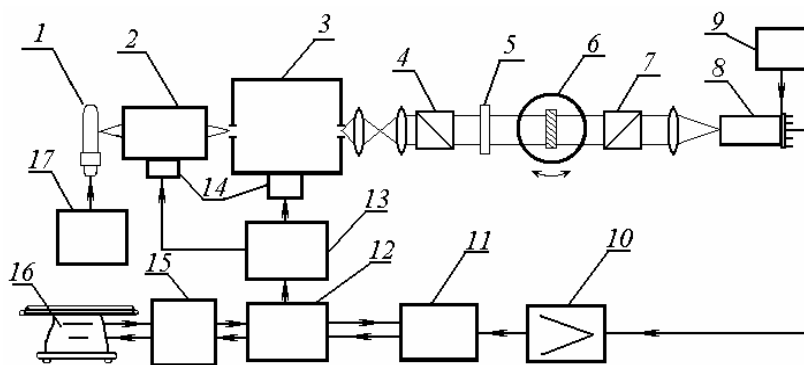


Рис. 1. Схема автоматизованої спектрополяриметричної установки:
 1 – джерело випромінювання (дейтерієва лампа або лампа розжарення);
 2 – освітлювач; 3 – монохроматор МДР-12; 4 – поляризатор;
 5 – пластинка $\lambda/4$; 6 – поворотний столик, на якому кріпиться зразок;
 7 – аналізатор; 8 – фотопомножувач (ФЭУ-100, ФЭУ-62);
 9 – блок живлення фотопомножувача; 10 – підсилювач постійного струму;
 11 – цифровий вольтметр; 12 – пристрій введення–виведення;
 13 – блок керування; 14 – крокові двигуни; 15 – комп’ютер;
 16 – принтер; 17 – блок живлення джерела випромінювання

Спектр поглинання $K(E)$ у глибині фундаментальної смуги нами розраховано за аналізом Крамерса–Кроніга (АКК) на основі виміряного спектра відбивання [1]. На ділянці довгохвильового краю поглинання розрахований спектр добре стикується з безпосередньо вимірним (рис. 2).

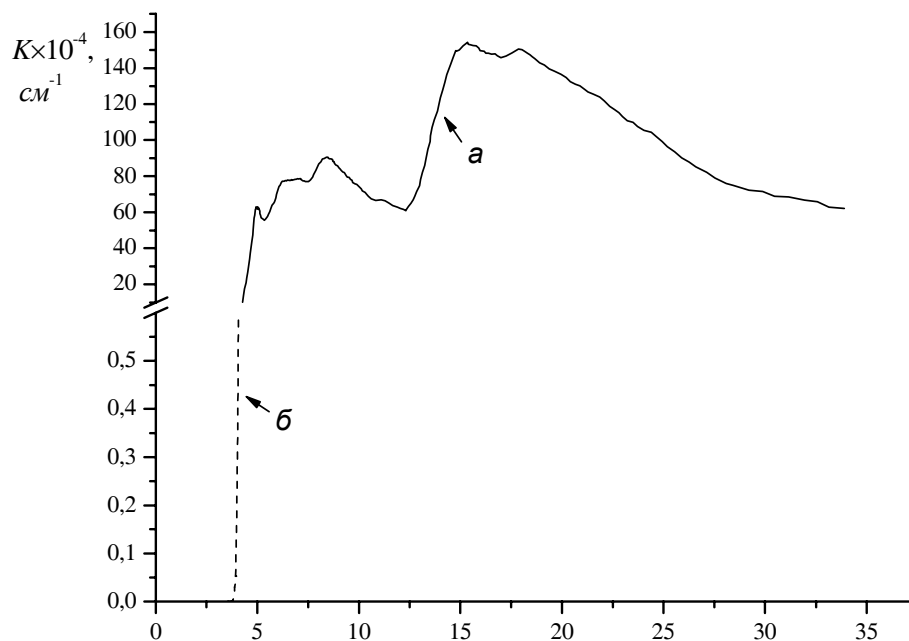


Рис. 2. Спектр фундаментального поглинання парателлуриту:
 а – обчислення за співвідношенням Крамерса–Кроніга;
 б – вимірне крайове поглинання

При вимірюванні дисперсії поворотної здатності записувався спектр пропускання системи „поляризатор – оптично активний кристал – аналізатор” (ПКА) (рис. 3).

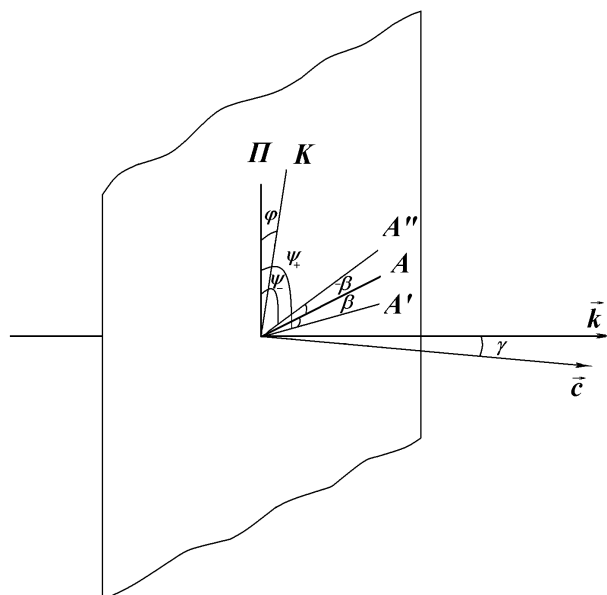


Рис. 3. Основні вектори системи ПКА

Функція пропускання системи ПКА має вигляд:

$$I = I_0 \left[\cos \varphi \cos \psi + \frac{\alpha_0}{l} \sin \varphi \left(\sin \psi - \frac{a}{p^2} \sin(2\theta + \psi) \right) \right]^2 + \left[\frac{a}{pl} \sin \varphi \cos(2\theta - \psi) \right]^2, \quad (1)$$

де $\varphi = \frac{\omega}{2c} (n_+ - n_-)d = kd \frac{n_+ - n_-}{2}$; $p = \frac{1}{n_+} + \frac{1}{n_-}$; $l = \left| \frac{1}{n_+} - \frac{1}{n_-} \right|$; I_0 та I – інтенсивності світла

на вході та виході системи; d – товщина зразка; ψ – кут між напрямками коливань в поляризаторі й аналізаторі; θ – кут між головними напрямками поляризатора та кристала; α_0 – скалярний параметр, який характеризує оптичну активність кристала; a – параметр, що характеризує лінійну анізотропію кристала; n_+ та n_- – показники заломлення ліво- і правочиркулярно поляризованих світлових хвиль.

Спектри пропускання системи ПКА ми записували в геометрії $\gamma = 0$ ($\vec{k} \parallel \vec{c}$), коли $a = 0$ і

$\frac{\alpha_0}{l} = 1$, та при $\psi_{\pm} = \frac{\pi}{2} \pm |\beta|$:

$$T_{\pm\beta}(\lambda) = \cos^2 \left[\varphi(\lambda) - \frac{\pi}{2} \mp |\beta| \right] = \sin^2 [\varphi(\lambda) \mp |\beta|]. \quad (2)$$

Різницевий спектр

$$\Delta T(\lambda) = T_{-\beta}(\lambda) - T_{+\beta}(\lambda) = \sin[2\varphi(\lambda)] \sin|2\beta|, \quad (3)$$

Звідси питома поворотна здатність

$$\vartheta(\lambda) = \frac{1}{2d} \arcsin \left[\frac{\Delta T(\lambda)}{\sin|2\beta|} \right]. \quad (4)$$

3. Структура спектра поглинання

У спектрі парателуриту в глибині фундаментальної смуги поглинання (рис.4) вузька смуга А пов'язується нами з екситонним поглинанням, смуги В, С, D, F – з міжзонними переходами.

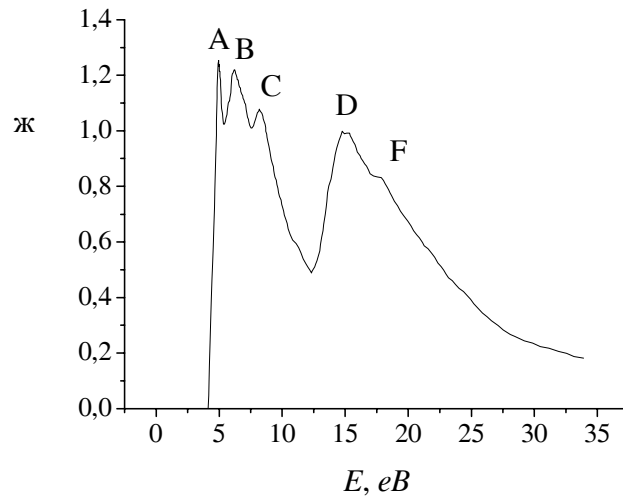


Рис. 4. Спектр показника поглинання $\alpha(E) = \frac{c\hbar K(E)}{2E}$ кристала TeO_2

Оскільки у випадку гіротропії кристалічного походження, як показано в [2,3], дисперсія поворотної здатності описується формулою $\vartheta(\lambda) = \frac{S\lambda^2}{(\lambda^2 - \lambda_0^2)^2}$, нами було здійснено відповідну апроксимацію і знайдено параметри: $S = 24,97$; $\lambda_0 = 241,43$ нм ($E_0 = 5,13$ eB). Резонансна енергія E_0 майже збігається з положенням А-піка ($E_A = 5,01$ eB). Залежність же $\varepsilon(\lambda) = n^2(\lambda)$, яка визначається силою лінійного ефективного осцилятора, у спектральному діапазоні 0,40–1,05 мкм добре описується формулою Друде–Зельмеєра з параметрами: $S_1 = 3,71$; $\lambda_0 = 197,52$ нм ($E_0 = 6,27$ eB), де $S_1 = Ne^2 f \lambda_0^2 / (\pi m c^2)$. Як видно, в цьому випадку λ_0 близьке до піка смуги міжзонного поглинання ($E_B = 6,23$ eB).

4. Параметри гіроактивного осцилятора

Було визначено найголовніші параметри екситонного А-піка, який ідентифікується нами як такий, що пов'язаний з основним гіроактивним осцилятором парателуриту. Для цього необхідно насамперед знайти приведену ефективну масу носіїв μ , оскільки TeO_2 є гіротропним напівпровідником. Край поглинання описується функцією

$$K(E) = \frac{2e^2(2\mu)^{3/2}}{m^2 c \hbar^2 n} |P_d|^2 \frac{(E - E_g)^{1/2}}{E}, \quad (5)$$

де $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$, $|P_d|^2 = \frac{mE}{2} f$ – квадрат матричного елемента дипольного переходу; n – показник заломлення кристала при $E = E_A$; E_g – величина міжзонного інтервалу; f – сила осцилятора.

З (5) отримуємо:

$$K^2(E) = \frac{8\mu^3 e^4 f^2}{m^2 c^2 \hbar^4 n^2} (E - E_g), \quad (6)$$

звідки крутизна краю

$$\frac{\Delta[K^2(E)]}{\Delta E} = b = \frac{8\mu^3 e^4 f^2}{m^2 c^2 \hbar^4 n^2} \quad (7)$$

і вираз для приведенної ефективної маси набуває вигляду

$$\frac{\mu}{m} = \frac{1}{2} \left(\frac{r_B^2 m c^2 n^2 b}{f^2} \right)^{1/3} = 1,42 \cdot 10^{-8} \left(\frac{n^2 b}{f^2} \right)^{1/3}. \quad (8)$$

На рис. 5 зображено залежність $K^2(E)$, лінійний хід якої у широкому інтервалі змін K вказує на придатність апроксимації (6).

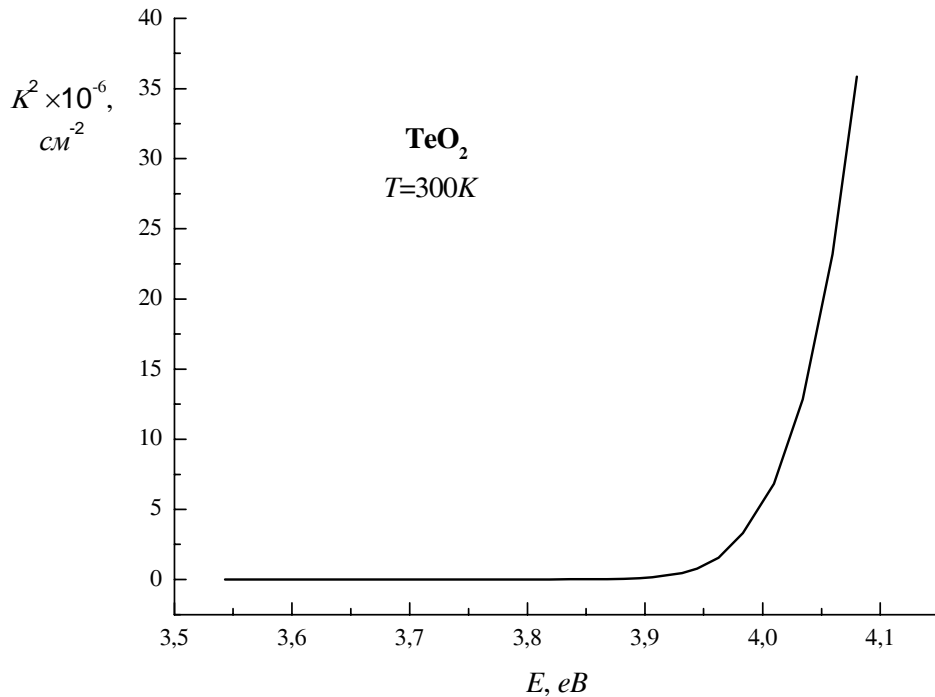


Рис.5. Залежність $K^2(E)$ у прикордонній області

Експериментально визначений параметр крутизни краю поглинання TeO_2 дорівнює

$$b = 6,1858 \times 10^8 \text{ см}^{-2}/\text{eV}.$$

Силу осцилятора f ми визначили за формулою Смакули [4]:

$$f = 1,29 \cdot 10^{17} \frac{1}{N} \frac{n}{(n^2 + 2)^2} K_{max} H, \quad (9)$$

де K_{max} – коефіцієнт поглинання у максимумі смуги гіроактивного осцилятора, H – напівширина цієї смуги, N – кількість осциляторів в одиниці об'єму, тобто

$$1/N = V/(zN_{ef}),$$

де V – об'єм елементарної комірки парателурита, z – кількість формульних одиниць в елементарній комірці кристала, N_{ef} – ефективне число валентних електронів, що беруть участь у міжзонних переходах при $E=E_A$. Функцію $N_{ef}(E)$ (у розрахунку на формульну одиницю) обчислено методом АКК і зображено на рис. 6.

Підставивши параметри: $K_{max} = 56,86 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $H = 0,8045 \text{ eV}$, $V = ac^2 = 176,36 \cdot 10^{-24} \text{ см}^{-3}$, $z = 4$ і $N_{ef} = 0,3$, отримуємо $f = 0,249$.

За формулою (8) знаходимо $\mu/m = 0,518$, відтак можемо обчислити основні параметри гіроактивного екситона TeO_2 :

енергію дисоціації екситона

$$G_A = R \frac{(\mu/m)}{\varepsilon^2} = 115 \text{ meV}, \quad (10)$$

радіус екситона

$$r_A = \frac{r_B \varepsilon}{(\mu/m)} = 8,0 \text{ \AA}. \quad (11)$$

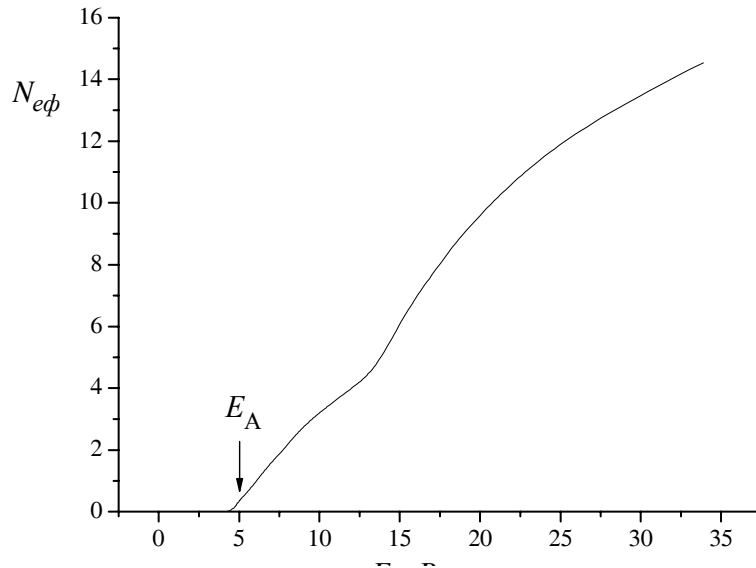


Рис. 6. Функція $N_{\text{eff}}(E)$ кристала TeO_2

Висновок

Вперше на прикладі гіротропного напівпровідникового кристала парателуриту зроблено спробу розрізнити та ідентифікувати лінійні та гіроактивні осцилятори, що відповідають за дисперсії показників заломлення і поворотної здатності у широкому спектральному діапазоні (область прозорості та прикорйова область). Показано, що в TeO_2 функція $\mathcal{A}(E)$ визначається гіроактивним ефективним осцилятором екситонної природи (циркулярний екситон). Той факт, що радіус екситона виявився близьким до параметра ґратки c ланцюжкової структури TeO_2 ($c = 7,6 \text{ \AA}$), вказує, що у парателуриті, вірогідно, маємо справу з екситонами проміжного радіуса.

1. Takizawa T., Ohwada H., Kato H., Fukutani H./ *J.Phys.Soc.Jpn.*, 1989, V.58, N6, P.2167-2172.
2. Chandrasekhar S. *Proc.Ind.Acad.Sci.*, 1953, V.37A, P.468–484.
3. Агранович В.М, Гинзбург В.Л. *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теории экситонов.* – М.: Наука, 1979.
4. Довгий Я.О. *Формула Смакули // Укр. фіз. журнал.* – 1993. – Т.38, №7. – С.1001–1008.