

ВНУТРИСЛОЕВОЙ ФОТОУПРУГИЙ ЭФФЕКТ
В КРИСТАЛЛАХ GaSe

© Н.С.Авержиев, Ю.В.Илисовский, Л.А.Кулакова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 12 июля 1996 г.)

Методами брэгговской дифракции света на звуке и наведенного двулучепреломления получены значения внутрислоевых компонент тензора фотоупругости (p_{11} , p_{21} , p_{66}) как вблизи края фундаментального оптического поглощения, так и вдали от него. Данные анализируются в рамках модели виртуальных экситонных переходов. Из сравнения с экспериментом получены значения констант деформационного потенциала, в том числе отвечающих за обменное расщепление, а также энергии непрямого экситонного перехода.

Анизотропия слоистых кристаллов проявляется в упругих, тепловых, оптических и других свойствах кристаллов, имея зачастую настолько яркий характер, что позволяет говорить о двумерности их строения [1,2]. Существенное дополнение к уже существующим представлениям может внести изучение влияния анизотропии сил связи на фотоупругий эффект. При исследовании фотоупругих модулей p_{33} , p_{13} , p_{31} GaSe в [3] и в нашей предыдущей работе обнаружена большая анизотропия их дисперсионных зависимостей вблизи края фундаментального оптического поглощения и получены оценки значений соответствующих дипольных матричных элементов и констант деформационного потенциала.

Данная работа посвящена исследованию фотоупругого эффекта внутри слоя кристаллов. Для измерений, помимо метода брэгговской дифракции света на звуке [3,4], использовался метод наведенного двулучепреломления [5], основанный на изменении показателя преломления при одноосной деформации растяжения в слое. Это позволило определить не только величину (совпадающую с полученной из брэгговской дифракции), но и знак p_{66} . Измерения двулучепреломления велись при $T = 300$ К и длине волны $\lambda = 0.63$ и 1.15μ , в то время как для брэгговской дифракции, дополнительно к этому, плавное изменение положения относительно края поглощения достигалось (как и в [3]) благодаря увеличению ширины запрещенной зоны при охлаждении (до $T = 100$ К):

Измеренные таким образом зависимости модулей p_{11} , p_{21} , p_{66} от относительной частоты представлены на рис. 1. Из рисунка видно, что

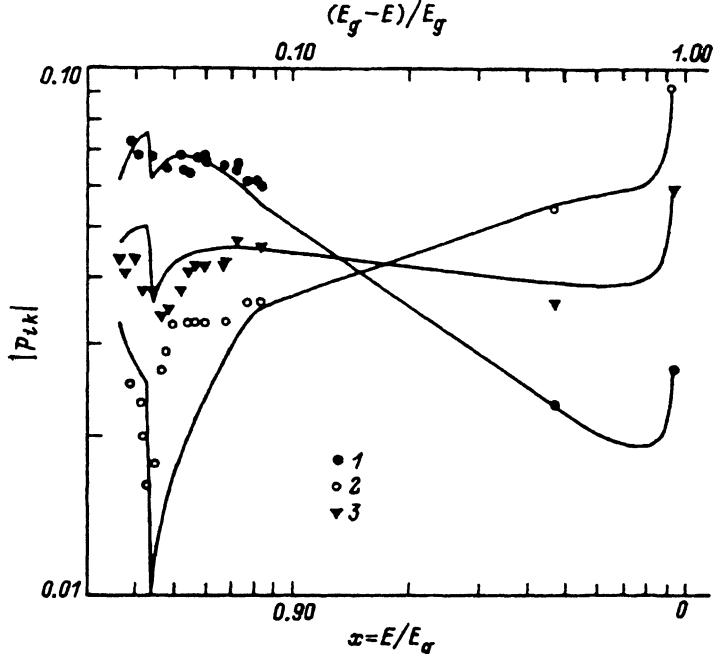


Рис. 1. Дисперсионные зависимости модулей фотоупругих коэффициентов p_{ijk} . Точки — эксперимент: 1 — p_{11} , 2 — p_{21} , 3 — p_{66} ; при $(E_g - \hbar\omega)/E_g < 0.1$ $E_g = E_g(T)$, $\lambda = 0.63 \mu$, при $(E_g - \hbar\omega)/E_g > 0.1$ $E_g = E_g(T = 300 \text{ K}) = \text{const}$, $\lambda = 1.15, 10.6 \mu$. Сплошные линии — теория: $p_{ijk} = p_{ijk}^d + p_{ijk}^{ind} + p_{ijk}^{ph} + p_{ijk}^0$.

величина фотоупругого эффекта в слое существенно меньше внеслоевого: из сравнения данных работы [3] и рис. 1 получаем $p_{33}/p_{11} \approx 10$. Кроме того, дисперсионные зависимости внутрислоевых констант, с одной стороны, значительно слабее, с другой — в них наблюдается резонансоподобная особенность вблизи края, но возникающая на несколько большем удалении от него, чем для констант p_{13} , p_{33} , p_{31} . Соотношение значений p_{11} , p_{21} и p_{66} вполне вписывается в характерное для гексагональных кристаллов соотношение $p_{66} = (p_{11} - p_{21})/2$, если предположить, что p_{21} имеет знак, противоположный p_{11} во всей области спектра, что в свою очередь означает неизменность знака p_{66} для всех λ . Действительно, из наших данных по пьезодвулуччепреломлению вытекает, что $p_{66} > 0$. Отсюда следует, что $p_{11} > 0$, а $p_{21} < 0$ во всей исследованной области частот.

Как показано в предыдущей работе [6], выражение для фотоупругих модулей, включающих в себя вклад от прямых электронных и экситонных переходов, имеет вид

$$p_{ijk}^d = -\frac{1}{\varepsilon_i^2} \left\{ -P_i^2 \cdot \Lambda_k m [F(x) + D \cdot G(x)] + M_{ik} \cdot q \cdot [f(x) + Dg(x)] \right\}, \quad (1)$$

где $M_{ik} = \frac{dP_i^2}{dS_k} + \frac{3}{2} \left(\frac{d\mu}{dS_k} \right) \cdot \frac{P_i^2}{\mu_1}$, а выражения для всех входящих в (1) величин приведены в [6].

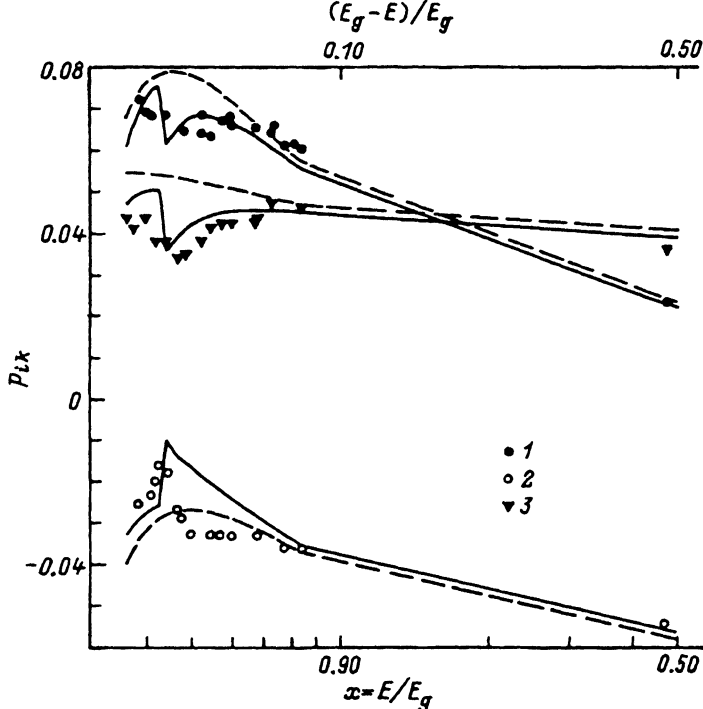


Рис. 2. Дисперсионные зависимости фотоупругих коэффициентов p_{ik} .

Точки — эксперимент: 1 — p_{11} , 2 — p_{21} , 3 — p_{66} . Линии — теория: штриховые — $p_{ik}^d + p_{ik}^0$, сплошные — $p_{ik}^d + p_{ik}^{ind} + p_{ik}^0$.

Проанализируем (1) применительно к внутрислоевому эффекту. Резонансный вклад (первый член (1)) в p_{11} и p_{21} должен быть одинаковым, а в случае p_{66} он равен нулю. Что касается нерезонансных вкладов (второй член (1)) в p_{11} и p_{21} , то их различие возникает из-за различной зависимости матричных элементов P_1^2 и P_2^2 и приведенных эффективных масс $\mu_{\perp, \parallel}$ от деформации, что должно приводить к ненулевому нерезонансному члену для p_{66} . Этот факт качественно хорошо согласуется со слабой дисперсией, наблюдаемой на эксперименте для p_{66} (рис. 1). Однако добиться количественного согласия расчетных кривых ($E_g = 2.02$ eV, $E_{ex}^0 = 0.03$ eV) с экспериментальными в рамках предположений о равенстве резонансных членов не удастся.

Рассмотренный выше резонансный вклад в фотоупругость связан со сдвигом уровней под влиянием деформации. Однако в [7] показано, что деформация в слое может приводить не только к смещению экситонных уровней, но и к их расщеплению, что дает дополнительный вклад в резонансную фотоупругость. В селениде галлия имеется вырождение экситонных состояний, связанное со спином электрона и дырки. Поскольку спин электрона и дырки равен $1/2$, то вследствие обменного взаимодействия четырехкратно вырожденный основной уровень экситона расщепляется на 3 подуровня. Два невырожденных уровня характеризуются нулевым значением проекции суммарного спина частиц на гексагональную ось, (волновая функция Z — типа), а один

Значения параметров ближних зон, величины бездисперсионного вклада в фотоупругий эффект (p_{ik}^0) внутри слоя кристаллов GaSe и соответствующих констант Грюнайзена (Γ_{ik}) оптических фононных ветвей

ik	Λ_{ik} , eV	P_i^2 , $10^{-29} \text{ g} \cdot \text{eV}$	M_{ik} , $10^{-26} \text{ g} \cdot \text{eV}$	p_{ik}^0	Γ_{ik}
11	-9.5	2.7	-9.5	-0.009	-1
21	-9.5	2.7	-6.1	-0.078	4

двукратно вырожденный имеет симметрию волновых функций типа X, Y. Под действием деформации S_{11} и S_{22} этот подуровень расщепляется, причем соответствующая компонента деформационного потенциала оказывается пропорциональна величине обменного взаимодействия [7]. Соответствующее выражение для ϵ может быть записано в виде

$$\epsilon_{11}^{\text{ex}} = 8 \frac{\pi e^2}{m_0^2 \omega^2} \Phi^2(0) P_1^2 \frac{1}{E_g - E_{\text{ex}}^0 - \delta - c(S_{11} - S_{22})/2 - \hbar\omega}. \quad (2)$$

Здесь δ , c — соответственно сдвиг энергии экситона и константа деформационного потенциала, связанные с обменным взаимодействием, значения остальных величин приведены в [6]. Выражение для ϵ_{22} отличается от (2) заменой 1 на 2. Обращаясь к (1), видим, что E_g изменяется одинаково при деформациях S_{11} и S_{22} , в то время как в знаменателе (2) имеется добавка $c \cdot (S_{11} - S_{22})/2$, знак которой различен для S_{11} и S_{22} . Поэтому в области фотоупругого резонанса p_{11} и p_{12} (равная p_{21}) должны отличаться на величину, пропорциональную константе c , иначе говоря, должна проявляться некоторая эффективная константа деформационного потенциала $\Lambda_k^{\text{eff}} = \Lambda_k \pm c/2$. Согласно оценкам [7], величина c может быть достаточно большой (порядка 1 eV), в то время как $\delta \sim 10 \text{ meV}$. Расчет теоретических зависимостей p_{ik} внутри слоя ($i, k = 1, 2$) с учетом (1) и (2) действительно дает общее согласие с экспериментом (штриховые линии на рис. 2) при $c = -3 \text{ eV}$. Используемые значения $P_1^2 = P_2^2$, $\Lambda_1 = \Lambda_2$, M_{11} и M_{21} приведены в таблице, а $\Phi^2(0)$ взято из [6].

При этом, однако, не объясняются особенности в поведении p_{66} , p_{21} , наблюдаемые в области энергий, меньших, чем энергия прямого экситонного перехода даже с учетом обменного взаимодействия. Как показано в [2], в этой области частот в GaSe возможен резонанс, связанный с непрямым экситонным переходом. Согласно [8], он имеет «электроподобный» вид.

Используя выражение для вклада в диэлектрическую проницаемость не прямых экситонных переходов, полученное в [6], запишем резонансный вклад в p_{11} и p_{21} от такого перехода, возникающий благодаря сдвигу уровня под влиянием деформации. Нерезонансным членом, в силу его малости, пренебрегаем. При дифференцировании ϵ_i^{ind} по S_{kk} необходимо учитывать, что на изменение E'_g , E''_g влияет ориентация данного непрямого экстремума по отношению к направлению дефор-

мадии. Так, при деформации в плоскости слоя (плоскость XU) происходит снятие вырождения экстремумов по энергии,¹ а именно четыре из них имеют одну энергию, а два оставшихся — другую. Это дает соответствующую анизотропию вклада в фотоупругий эффект

$$p_{ik}^{ind} = \alpha_{ik}[A \cdot (N + 1) + B \cdot N], \quad N = \frac{1}{\exp(\hbar\Omega/kT) - 1},$$

$$A = \frac{\sqrt{2\sqrt{E_g'^2 + \Gamma^2} + E_g'}}{\sqrt{E_g'^2 + \Gamma^2}} - \frac{\sqrt{\sqrt{(E_g' - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2} + (E_g' - \hbar\omega)}}{\sqrt{2}\sqrt{(E_g' - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}} - \frac{\sqrt{\sqrt{(E_g' + \hbar\omega)^2 + \Gamma^2} + (E_g' + \hbar\omega)}}{\sqrt{2}\sqrt{(E_g' + \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}},$$

$$\alpha_{ik} = A_{ik} \cdot \lambda_k, \quad (\Delta E_g') = (\Delta E_g'') = \lambda_k S_{kk}. \quad (3)$$

B получается из A заменой E_g' на E_g'' (см. [6]). Включение вклада от непрямого перехода, согласно (3), с учетом снятия вырождения для непрямых минимумов ($\alpha_{11} = -\alpha_{21}$) дает хорошее согласие с экспериментом (рис. 2). При этом были приняты следующие значения: $\hbar\Omega = 10 \text{ meV}$, $\Gamma = 3 \text{ meV}$, $E_{ex}^{ind} = E_g - 0.076 \text{ eV}$, $\alpha_{11} = -\alpha_{21} = -0.001$.

Для объяснения поведения p_{ik} вдали от края, оценим вклад оптических фононов p_{ik}^{ph} в фотоупругий модуль. Для этого используем соответствующее выражение из [6]

$$p_{ik}^{ph} = -\Gamma_i \cdot (2/\varepsilon_i^2) \cdot (\varepsilon_i^\infty - \varepsilon_i^0) \cdot (\omega_0^i/\omega)^2$$

и воспользуемся экспериментальными данными работы [9]: $\omega_0^3 = 230 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_0^1 = 237 \text{ cm}^{-1}$, $\varepsilon_1^\infty = 7.45$, $\varepsilon_1^0 = 9.8$, $\varepsilon_3^\infty = 7.1$, $\varepsilon_3^0 = 7.6$, полученными из дисперсионных зависимостей диэлектрической проницаемости в инфракрасной области спектра. Результаты расчета p_{ik} с учетом всех вкладов, включая и вклад оптических фононов, с параметрами, приведенными в таблице, дают хорошее согласие с экспериментом (рис. 1) во всем исследованном интервале оптического спектра. Следует отметить, что значение P_1^2 , полученное в данной работе, хорошо согласуется с полученными в предыдущей работе из данных о p_{13} .

Таким образом, исследование внутрислоевых констант фотоупругого эффекта позволило получить значения P_1^2 , M_{ik} , обнаружить проявление обменного взаимодействия между электроном и дыркой в прямом экситоне, а также наличие вклада от непрямого экситонного перехода. При этом оценены константа деформационного потенциала s , определяющая расщепление уровней прямого экситона под влиянием

¹ Отметим, что при деформации, перпендикулярной слою, вырождение экстремумов сохраняется.

деформации в слое, значение энергии непрямого экситона, а также установлено, что $\Lambda_1 < 0$. Последнее обстоятельство, с одной стороны, хорошо согласуется с данными работы [10], с другой стороны, позволяет (из анализа (1) и экспериментальных данных) однозначно установить, что p_{11} и $p_{66} > 0$, а $p_{12} < 0$. Вдали от края поглощения учтен вклад оптических фононов и получены оценки констант Грюнайзена соответствующих оптических фононных ветвей.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 95-02-04093-а).

Список литературы

- [1] Г.Л. Беленький, В.Б. Стопачинский. УФН **140**, 2, 233 (1983).
- [2] M. Schlüter. Nuovo Cimento **13**, 2, 313 (1973); C. Hamaguchi, K. Wasa, M. Yamawaki. Phonon Scattering in Condensed Matter/ Ed. H.J. Maris. Plen. Press. N.Y.-London (1979). P. 441-444.
- [3] Н.С. Аверкиев, Ю.В. Илисавский, Л.А. Кулакова. Акуст. журн. **40**, 1, 151 (1994).
- [4] R.W. Dixon. IEEE Tras. **QE-3**, 87 (1967).
- [5] C.W. Higginbotham, M. Cardona, F.H. Pollak. Phys. Rev. **184**, 821 (1969).
- [6] Н.С. Аверкиев, Ю.В. Илисавский, Л.А. Кулакова. ФТТ **38**, 12, 3557 (1996).
- [7] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука. М. (1972).
- [8] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. ФМ. М. (1978).
- [9] P.C. Leung, G. Andermann, W.G. Spitzer, C.A. Mead. J. Phys. Chem. Sol. **27**, 1, 849 (1966).
- [10] Н.П. Гавалешко, М.В. Курик, Г.Б. Делевский, З.Д. Ковалюк, А.И. Савчук, И.Ф. Скицко. УФЖ **19**, 10, 1741 (1974).