

ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ Tl_3SbS_3

Довгий Я. О., Китык И. В., Маньковская И. Г.,
Евстигнеева Л. Н.

Проведены исследования поляризованных спектров поглощения и фотопроводимости полупроводников Tl_3SbS_3 в окрестности собственного поглощения, а также спектров отражения в спектральной области от 1.5 до 6.0 эВ. На основании полученных спектров установлено, что ширина энергетической щели имеет анизотропию и равняется 1.48 и 1.65 эВ для $E \perp C$ и $E \parallel C$ соответственно. При этом исходя из температурных исследований проводилось отделение экситонных резонансов. На основании соотношений Крамерса—Кронига рассчитаны спектры действительной $\epsilon_1(E)$ и мнимой $\epsilon_2(E)$ частей диэлектрической проницаемости, что необходимо для установления связи между параметрами электронной структуры (межзонных интервалов) и оптическими спектрами. Проведена качественная идентификация полученных оптических спектров.

В последнее время все большее внимание уделяется сложным полупроводниковым материалам, получаемым на основании соединений классов халькогенидов, галогенидов и халькогалогенидов [1], поскольку многие из них обладают комплексом важных оптоэлектронных и фотоэлектронных свойств и имеют широкую область пропускания в ИК области спектра, большие показатели преломления и четко выраженную анизотропию. Кроме того, за счет значительно большей поляризуемости атомов халькогенов и галогенов по сравнению с кислородом эти материалы представляются перспективными в плане проявления нелинейно-акусто- и электрооптических характеристик.

Среди них особенно перспективными являются монокристаллы Tl_3SbS_3 , обладающие широкой областью прозрачности (1.0—13.0 мкм), имеющие, кроме всего прочего, и значительный акустооптический эффект [2].

Однако дальнейшее их использование (в особенности в качестве узла оптоэлектронных систем) сдерживается отсутствием количественных параметров зонной структуры. Наиболее информативными в этом плане являются оптические спектры в глубине фундаментального межзонного поглощения.

С целью выяснения энергетических параметров зон в данной работе проведены исследования спектров отражения монокристаллов [пространственная группа $R\bar{3}m (C_{3h}^2)$] для двух поляризаций света ($E \perp C$ и $E \parallel C$). Измерения проводились в спектральной области 1—6 эВ, в которой размещены основные полосы, соответствующие переходам между валентной зоной и зоной проводимости.

Измерения проводились на спектрофотометрической установке, смонтированной на базе спектрофотометра СФ-4А. В качестве поляризатора использовалась призма Глана—Томсона. Угол падения света на образец не превышал 12° , что лишь незначительно изменяло френелевские соотношения для нормального падения света. Относительная погрешность определения коэффициента отражения составляла не более 3%. Корректировка с учетом шероховатости поверхности производилась по методике [3].

На рис. 1 и 2 приведены полученные спектры отражения для поляризаций света $E \perp C$ и $E \parallel C$ соответственно. На этих же рисунках приведены спектральные зависимости действительной $\epsilon_1(E)$ и мнимой $\epsilon_2(E)$ частей диэлектрической проницаемости, рассчитанные по соотношениям Крамерса—Кронига по методике [4]. Основные параметры спектров приведены в таблице. На рисунках

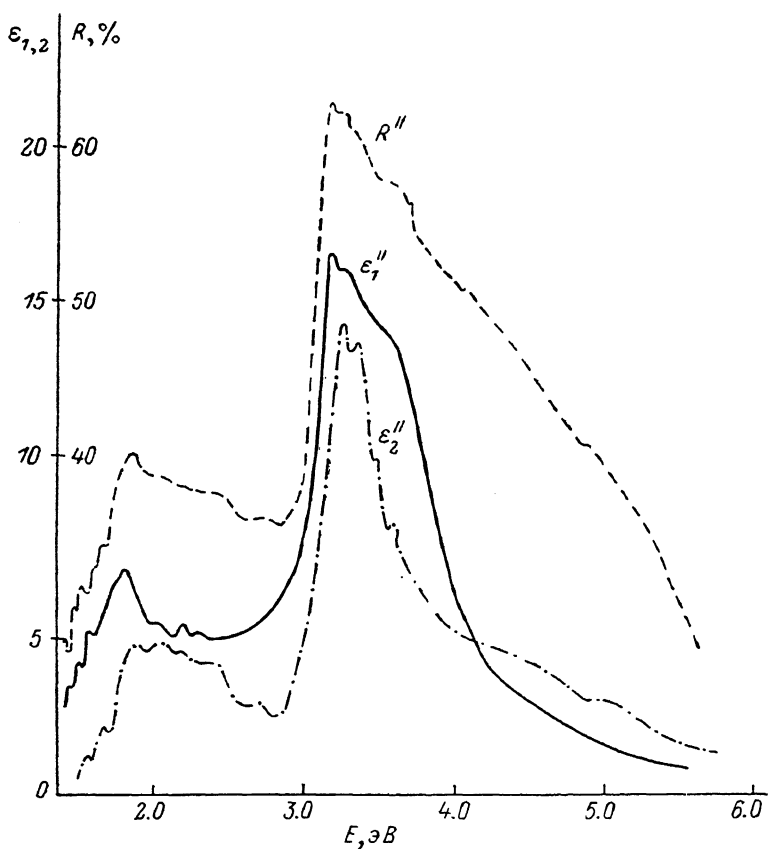


Рис. 1. Спектры отражения $R(E)$, спектры действительной $\epsilon_1(E)$ и мнимой $\epsilon_2(E)$ частей диэлектрической проницаемости монокристаллов Tl_3SbS_3 для поляризации света $E \parallel C$.

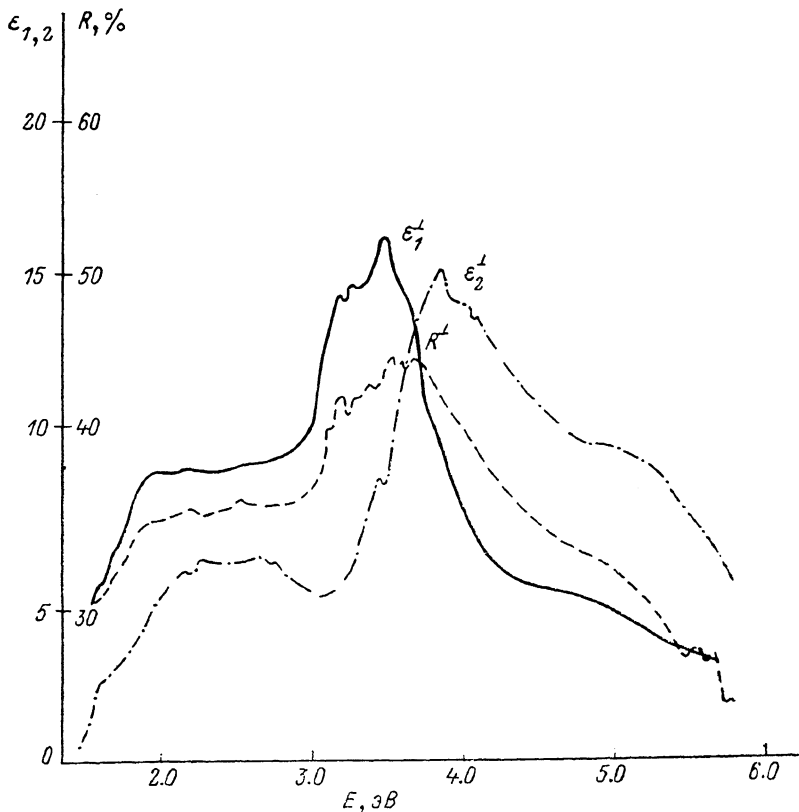


Рис. 2. Спектры отражения $R(E)$, спектры действительной $\epsilon_1(E)$ и мнимой $\epsilon_2(E)$ частей диэлектрической проницаемости Tl_3SbS_3 для поляризации света $E \perp C$.

Основные параметры спектров отражения кристаллов Tl_3SbS_3 для двух поляризаций света ($E \perp C$, $E \parallel C$)

$E \parallel C$		$E \perp C$		$E \parallel C$		$E \perp C$	
энергетическое положение пика, эВ	коэффициент отражения, отн. ед.	энергетическое положение пика, эВ	коэффициент отражения, отн. ед.	энергетическое положение пика, эВ	коэффициент отражения, отн. ед.	энергетическое положение пика, эВ	коэффициент отражения, отн. ед.
1.46	31.3	1.45	29.1	3.30	60.3	3.31	39.7
1.48	28.3	1.48	26.3	3.35	59.2	3.35	40.6
1.52	29.7	1.52	26.8	3.40	57.7	3.38	40.4
1.61	30.8	1.59	26.7	3.50	57.0	3.50	42.8
1.67	32.2	1.65	27.7	3.56	56.7	3.58	42.0
—	—	1.68	28.2	3.64	56.2	3.64	42.2
1.86	38.4	1.95	31.9	5.51	29.1	5.56	23.4
3.19	61.0	3.19	38.8	—	—	5.65	24.0
3.24	60.4	3.26	39.7				

нетрудно выделить две широкие спектральные полосы: первая — от 1.5 до 3.0, вторая — от 3.0 до 6.0 эВ. При этом налицо длинноволновое смещение при $E \parallel C$ по сравнению с таковым при $E \perp C$. При понижении температуры до азотной имеет место небольшое (до 7 мэВ) смещение основных максимумов. Естественно, что при этом за счет уменьшения электрон-фононного взаимодействия структура полос проявляется лучше. Некоторые пики сильно возрастают с понижением температуры (в частности, при 1.45 эВ), что указывает на их экситонное происхождение.

Расчитанные значения оптических функций особенно важны для установления непосредственной связи между макро- и микроскопическими (зонными) характеристиками кристалла. При этом они в определенной мере изменяют форму исходного спектра и смещают максимумы $\epsilon_2(E)$ по отношению к максимумам $R(E)$.

Полученные оптические функции наряду со значениями энергий атомных термов с учетом соответствующего кристаллохимического строения дают возможность заключить, что первая группа полос обусловлена переходами между валентной подзоной, сформированной гибридами p -состояниями серы с небольшой долей гибридных s -состояний таллия, и зоной проводимости, преимущественно происходящей из s -состояний таллия.

Вторая группа полос (от 3 до 6 эВ) соответствует вовлечению более глубоких состояний валентной зоны, происходящих из состояний сурьмы, а также переходам на более высокие состояния зоны проводимости, соответствующей p -состояниям сурьмы.

Таким образом, полученные спектры можно считать основой для определения количественных параметров Tl_3SbS_3 и его аналогов, столь необходимых для выяснения оптоэлектронных и фотоэлектрических свойств. При этом необходимы расчеты электронной структуры из первых принципов, что будет предметом отдельной работы.

Для определения ширины запрещенной зоны нами наряду со спектрами отражения проводились измерения поляризованных спектров поглощения. При этом отделялся вклад экситонного пика. Оказалось, что край собственного поглощения характеризуется также анизотропией и ширина запрещенной щели равна 1.48 и 1.65 эВ для $E \parallel C$ и $E \perp C$ соответственно. Значения, полученные нами при измерении фотопроводимости, оказались равными 1.49 и 1.69 эВ, что можно считать неплохим согласием, учитывая наличие большого количества свободных носителей.

Список литературы

- [1] Сложные халькогениды и халькогалогениды (получение и свойства). Львов, 1983. 184 с.
- [2] Chang J. C. // Opt. Eng. 1985. V. 4. N 1. P. 132—137.
- [3] Борец А. Н. // Физ. электрон. 1981. № 23. С. 90—92.
- [4] Довгий Я. О., Заморский М. К., Китык И. В. // Препринт ФМИ им. Г. В. Карпенко АН УССР. Киев, 1986. № 122.