

Электронная структура и оптические свойства твердого раствора $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ Ш.К. Исмаилов¹, А. С. Саидов², С. Каражанов², Д.М. Сапаева¹Ургенчский государственный Университет¹Физико-технический институт АН РУЗ²

Ранее нами был получен твердый раствор $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ из класса $(C_2^{IV})_{1-x}(A^3B^5)_x$ [1,2] методом жидкофазной эпитаксии. В данной работе приведены результаты теоретических исследований зонной структуры и оптических свойств твердого раствора $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ методом самосогласованного псевдопотенциала с помощью теории функционала плотности в рамках локальной плотности заряда для твердых растворов $(Ge_2)_1(InP)_0$, $(Ge_2)_{0,5}(InP)_{0,5}$, $(Ge_2)_{0,25}(InP)_{0,75}$ и $(Ge_2)_0(InP)_1$. Результаты расчетов зонной структуры твердого раствора $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ для этих составов приведен на рис 1. Аналогичное исследование проведено в [3] для твердого раствора $(Ge_2)_{1-x}(AsGa)_x$ методом линейная комбинация атомных орбиталей.

Как отмечалось в работе [2] твердый раствор $(Ge_2)_x(InP)_{1-x}$ кристаллизуется в решетку цинковой обманки (типа сфарелита). Параметр решетки (a) зависит от состава x. В данной работе мы рассматривали компонентные составы $x=0.25$ и $x=0.5$ с параметрами решетки $a=5.743$ Å и $a=5.673$ Å соответственно. Для этой цели рассмотрена элементарная ячейка, состоящая из восьми атомов, из которых один атом In в точке (0,0,0) и один атом P в (a/4,a/4,a/4) заменены атомом Ge. Другие же атомы In и P расположены в точках (a/2,a/2,0.0) (a/2,0.0,a/2) (0.0,a/2,a/2) и (3a/4,3a/4,a/4) (3a/4,a/4,3a/4) (a/4,3a/4,3a/4), соответственно. Процесс роста такого кристалла начинается от поверхности Ge.

Для тестирования использованной в данной работе компьютерной программы проведен расчет зонной структуры полупроводников Ge и InP. Сравнение результатов расчета зонной структуры этих полупроводников и приведенных в литературе показывает, что основные свойства этих кристаллов отражены правильно. Однако ширина запрещенной зоны рассчитывается неправильно, что связано с широко известным в научной литературе недостатком теории функционала плотности (см например [4]).

На рис. 1 (a) и (b) приведены зонные структуры $(Ge_2)_x(InP)_{1-x}$ для (a) $x=0,25$ и (b) $x=0.50$. Точками нарисована энергия Ферми, ниже которой все уровни заполнены электронами. Все уровни выше энергии Ферми – пустые, т.е. в равновесных условиях на них нет электронов.



При $x=0,25$ вблизи уровня Ферми E_F является похожей по форме на зонную структуру Ge. Верхний край валентной зоны приходится на $\vec{k}=0$, а нижний край зоны проводимости не соответствует точке $\vec{k}=0$, т.е. твердый раствор этого состава является не прямозонной. При $x=0.5$ верхний край валентной зоны и нижний край зоны проводимости расположены вдали центральной точки $\vec{k}=0$ зоны Бриллюэна.

Для выяснения роли d-электронов атомов Ge и In проведено исследование зонной структуры включая d-электроны в остов и в валентный комплекс. Показано, что энергетический уровень d-электронов находятся намного ниже по сравнению с s-зоной. Это означает, что включение d-электронов в рассмотрение не вносит существенную коррективу в электронные свойства твердых растворов $(Ge_2)_x(InP)_{1-x}$.

Проведено сравнение дисперсии для случаев, когда спин-орбитальное взаимодействие включено в рассмотрение и когда оно пренебрегается. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие в данном случае не играет существенную роль в электронных свойствах исследуемых твердых растворов.

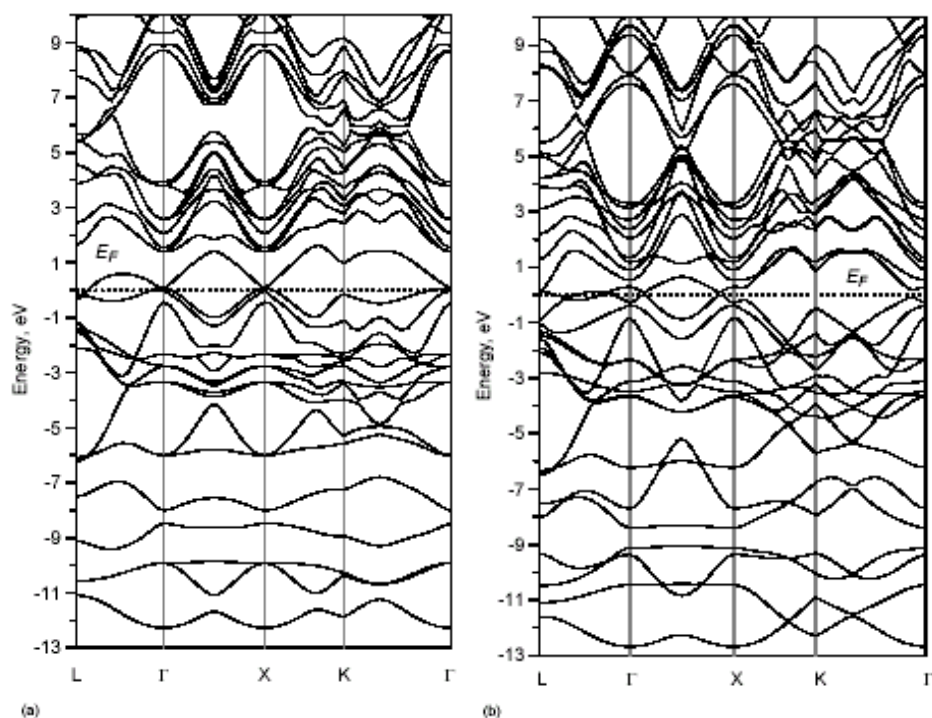


Рис.1. зонная структура твердого раствора $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ для составов (a) $x=0,5$ и (b) $x=0,75$ соответственно.

Как известно, фотоны обладающие достаточной энергией, могут возбуждать электроны из валентной зоны в зону проводимости. Вследствие этого оптические спектры полупроводников является источником богатой информации об их электронных свойствах. Во многих полупроводниках фотоны также могут взаимодействовать с колебаниями решетки и электронами в дефектах.



Поэтому мы исследовали некоторых оптических свойств твердых растворов $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ в рамках приближения локальной плотности заряда.

Для тестирования метода нами был получен спектральные зависимости оптических констант: ϵ_1 , ϵ_2 , $n(w)$, $n(w)$, $k(w)$, R , α для Ge и InP в интервале энергий от 0 до 20 эВ. Полученные результаты вычислений сопоставлялись с экспериментальными данными [5] соответствующих величин. Результаты сопоставления диэлектрических функций (ϵ_1 , ϵ_2) для Ge и InP приведена в рис.2.

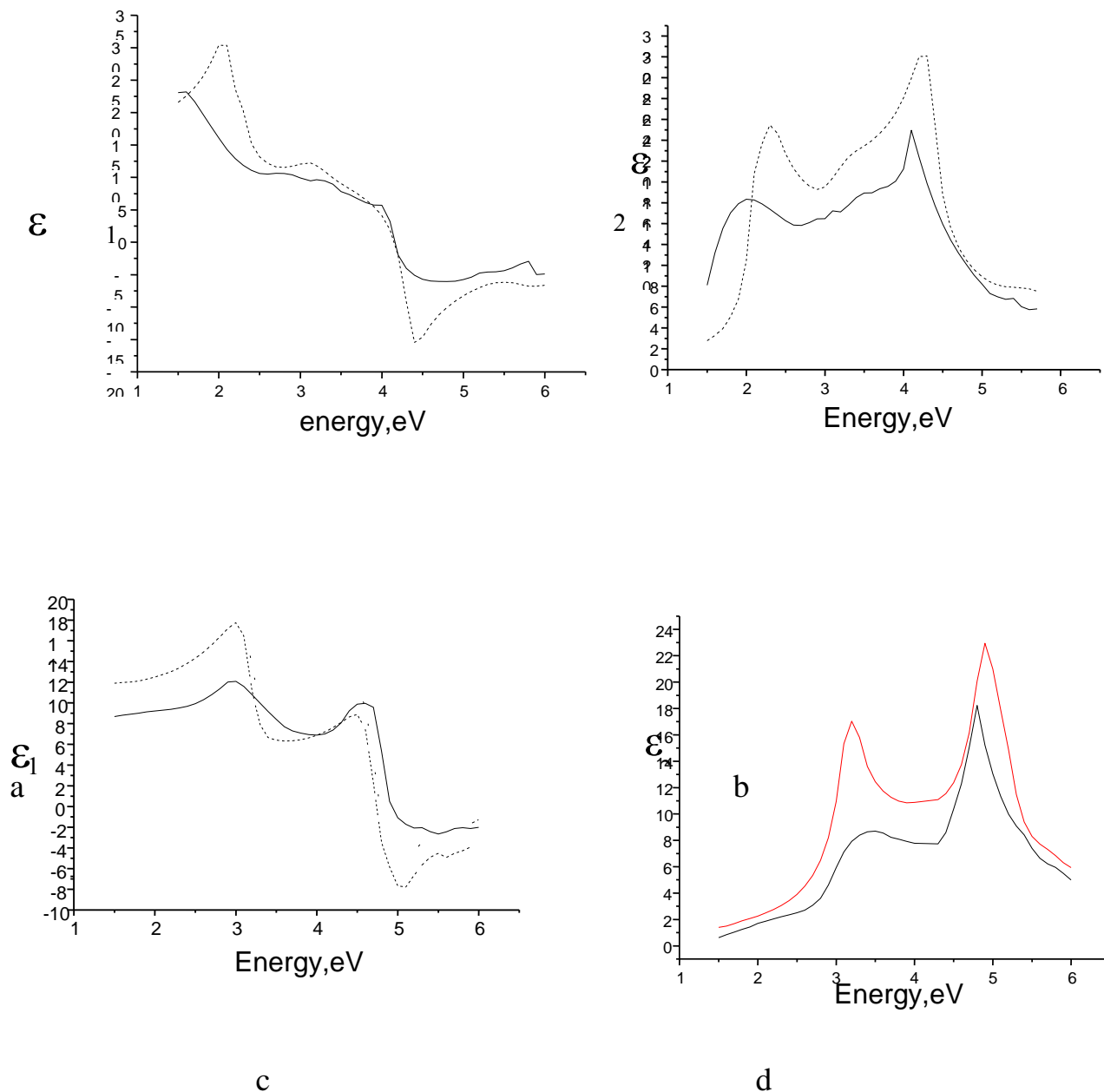


Рис. 2 Сравнение экспериментальной и расчетной диэлектрических функций (ϵ_1 –реальной часть, ϵ_2 –мнимая часть) Ge (a, b) и InP(c, d) Сплошная линия - теория, пунктир - эксперимент (2)



Как видна из рис. 2 во всех случаях наблюдается вполне хорошее согласие между теорией и экспериментом. В форме мнимой части диэлектрических функций имеется много общего. Как известно, подъём ϵ_2 связан переходами между абсолютным максимумом валентной зоны и минимумом зоны проводимости. В полупроводниках цинковой обманки эти переходы обычно происходит между валентной зоной Γ_{40} и зоной проводимости Γ_{1c} и обозначаются как E_0 . За E_0 следует пик E_1 связанный с переходами происходящий вдоль направления $\langle 111 \rangle$. ϵ_2 достигает абсолютного максимума за счет переходов приходящих в широком области зоны Бриллюэна вблизи границ в направления $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$.

Подобный сходства экспериментальных и расчетных оптических констант G_e и InP наблюдались не только для ϵ_1 , ϵ_2 а также для $n(\omega)$, $l(\omega)$ $n(\omega)$ и $k(\omega)$

Приведенные выше результаты показывает, что метод ПЛП довольно хорошо описывает спектральные зависимости оптических констант G_e и InP

Затем мы вычислили спектральные зависимости оптических констант твердого раствора $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ для составов $x=0,25$ и $x=0,5$ в интервале энергий от 0 до 20 эВ результаты вычислений диэлектрических функций даны в рис.3

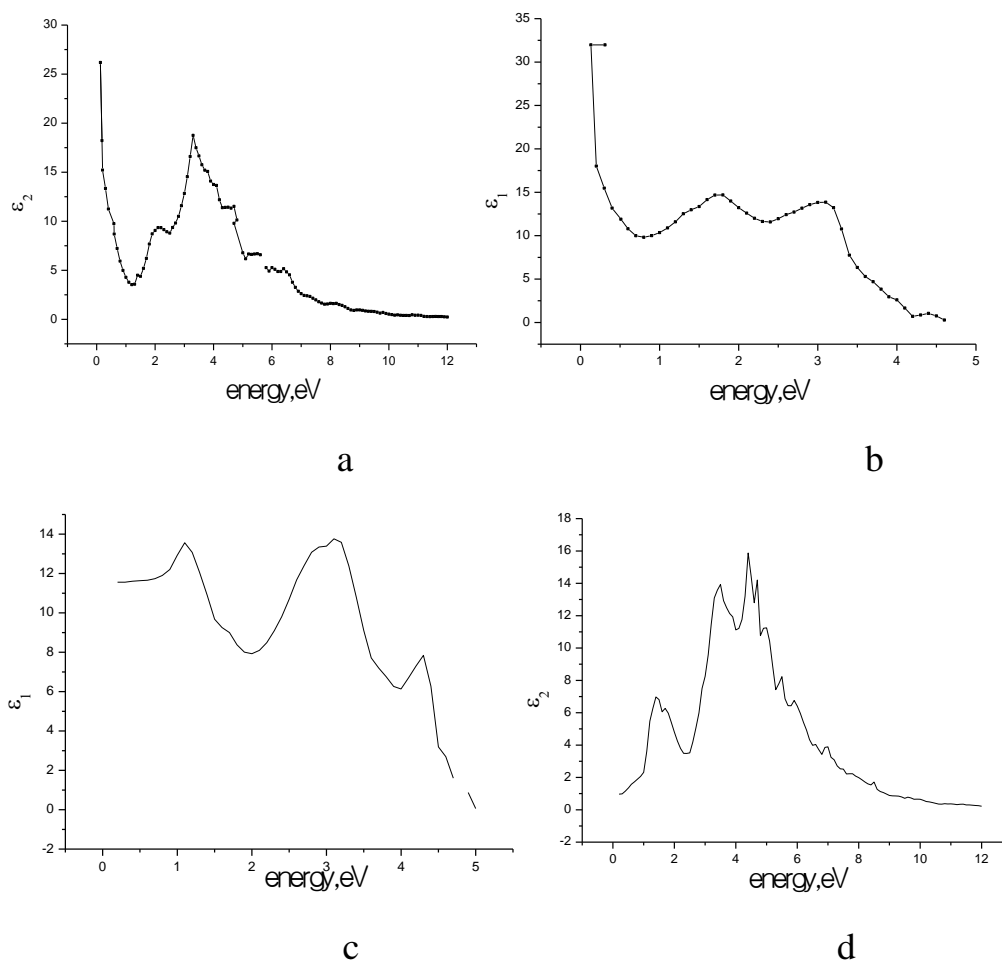


Рис 3. Спектральные зависимости диэлектрических функций (ϵ_1 ϵ_2) твердого раствора $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ для составов $x=0,25$ (a,b) $x=0,5$ (c,d)



По этим данным можно судит о возможных переходах из валентной оны в зону проводимости $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$

Литература:

1. А. С.Саидов, Э А.Кошчанов Ш.К. Исмаилов А Ш Раззаков. Письма в ТФ, 1999, том 25, вып.24 стр. 37-40.
2. А. С.Саидов, Э А. Кошчанов, Ш.К. Исмаилов, А Ш Раззаков. Труды международной конференции, посвященной 90-летию С.А.Азимова. стр.353-355.Ташкен-2004г.
3. А.И Губанов, А.М.Полубатко. Физика полупроводников. вып.4, 1982г. стр.753-754
4. Питер Ю , М.Кардона Физика полупроводников. Москва. Наука. 2003 г. стр. 71.
5. Гавриленко В. и др. “Оптические свойства полупроводников” Справочник, Киев,1987г. стр. 243-250.