

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

F. P. Kesamanly, S. G. Kroitoru, Yu. V. Rud',
V. V. Sobolev, N. N. Syrbu, Energy structure of
zones in certain $A^{II}B^{IV}C_2^V$ crystals, *Dokl. Akad. Nauk
SSSR*, 1965, Volume 163, Number 4, 868–869

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you
have read and agreed to these terms of use
<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 178.168.20.213

December 28, 2020, 13:25:09



Ф. П. КЕСАМАНЛЫ, С. Г. КРОИТОРУ, Ю. В. РУДЬ,
В. В. СОБОЛЕВ, Н. Н. СЫРБУ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЗОН
НЕКОТОРЫХ КРИСТАЛЛОВ ГРУППЫ $A^{IV}B^{IV}C_2^V$

(Представлено академиком Б. П. Константиновым 21 I 1965)

Обнаружение большой аналогии в природе химической связи у полупроводников со структурами сфалерита, вюртцита и халькопирита позволило в ряде работ (1, 2) предположить наличие многих общих черт и в энергетической структуре зон. В (2) теоретико-групповыми методами и методом эквивалентных орбит в предположении, что экстремумы валентных зон и зон проводимости расположены в точке $K = (0, 0, 0)$, была рассчитана структура зон полупроводниковых соединений типа $A^{IV}B^{IV}C_2^V$ со структурой халькопирита: самая нижняя зона проводимости простая, а самая верхняя валентная полоса состоит из трех зон; две верхние валентные зоны обусловлены анизотропией поля кристаллической решетки ($\Delta_{кр}$), а третья зона — спин-орбитальным расщеплением ($\Delta_{со}$). По грубым оценкам работ (2), в точке $K = (0, 0, 0)$ для $CdSnAs_2\Delta_{со} \approx 0,45$ эв, а $\Delta_{кр} \approx 0,01 - 0,03$ эв.

В последние годы, благодаря интенсивному развитию теории энергетических зон кристаллов в k -пространстве и установлению непосредственной связи между спектрами отражения в области $E > E_g$ и строением зон, стали успешно развиваться исследования спектров отражения кристаллов в области собственного поглощения (3-7).

В спектрах отражения кристаллов групп A^{IV} и $A^{III}B^V$ в области 1-6 эв, как правило, наблюдаются интенсивная коротковолновая полоса в области 4-6 эв и менее интенсивная дублетная полоса в области 1-4 эв (3-7). Структура спектров отражения кристаллов групп A^{IV} и $A^{III}B^V$ в хорошем согласии с теорией объясняется с точки зрения прямых разрешенных междузонных переходов: коротковолновая полоса в точке $X [K = (1, 0, 0)]$, а дублетная длинноволновая полоса — в точке $L [K = (1, 1, 1)]$, причем

дублетность полос отражения обусловлена спин-орбитальным расщеплением верхней валентной полосы в точке $L[\Delta_{со}(L)]$, а величина $\Delta_{со}(L) \approx 0,67\Delta_{со}(Г)$.

В настоящей работе нами предпринято исследование спектров отражения в области 1-6 эв при

$T = 293^\circ K$ кристаллов $ZnSnAs_2$, $ZnSiP_2$ и $ZnSiAs_2$. В спектральном распределении коэффициента отражения нами обнаружено в каждом кристалле по два интенсивных максимума; $\lambda 265$ и ~ 600 м μ ($ZnSnAs_2$); $\lambda 280$ и 330 м μ ($ZnSiPr$), $\lambda 275-295$ и 370 м μ ($ZnSiAs_2$), причем пик при $\lambda 600$ м μ у $ZnSnAs_2$ имеет дублетную структуру в виде двух максимумов $\lambda 550$ и $\lambda 650$ м μ (рис. 1 и 2).

По аналогии с рассуждениями работ (2) нами произведена оценка величин $\Delta_{со}(L)$ (см. табл. 1): по нашим качественным оценкам $\Delta_{со}(L)$ для

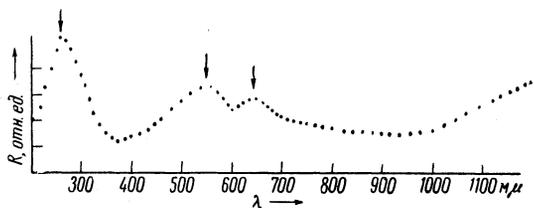


Рис. 1. Спектр отражения кристалла $ZnSnAs_2$

ZnSnAs₂ оказалось в 5—10 раз большей, чем для ZnSiP₂ и ZnSiAs₂; поэтому в спектрах отражения из-за сравнительно большой полуширины пиков отражения дублетная структура длинноволнового максимума отражения кристаллов ZnSiP₂ и ZnSiAs₂ может и не проявиться. По характеру спектрального распределения коэффициента отражения и положению полос спектра отражения кристаллов ZnSnAs₂, ZnSiP₂, ZnSiAs₂, с одной стороны, и кристаллов группы A^{IV}, A^{III}V^V, с другой стороны, эти полупроводниковые вещества оказались весьма сходными. Поэтому можно считать, что структура спектров отражения изученных нами кристаллов группы A^{II}B^{IV}C₂^V обусловлена прямыми разрешенными междузонными переходами в точках зоны Бриллюэна, аналогичных точкам L и X кристаллов групп A^{IV} и A^{III}V^V—L' и X' соответственно (см. табл. 1).

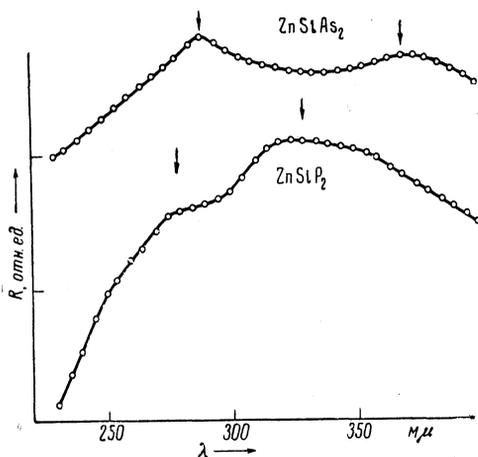


Рис. 2. Спектр отражения кристаллов ZnSiP₂ и ZnSiAs₂

Таблица 1

Значения величин междузонных расстояний в точках X' и L' ($E_{X'}$ и $E_{L'}$), $\Delta_{co}(L)$ и E_g (в эВ)

Кристалл	$\Delta_{co}(L)$		$E_{X'}$	$E_{L'}$	E_g
	расчет	опыт			
ZnSiP ₂	≈0,03	<0,1	4,43	3,76	2,3 ⁽⁸⁾
ZnSiAs ₂	≈0,07	<0,1	4,5÷4,2	3,35	2,1 ⁽⁸⁾
ZnSnAs ₂	≈0,3	≈0,34	4,7	2,25 и 1,91	0,65 ⁽⁸⁾

Таким образом, большое общее и детальное сходство спектров отражения кристаллов ZnSnAs₂, ZnSiP₂, ZnSiAs₂ и групп A^{IV}, A^{III}V^V убедительно свидетельствует о справедливости предположений работы⁽¹⁾ о весьма большом сходстве структур энергетических зон и природы химической связи соединений групп A^{II}B^{IV}C₂^V и A^{IV}, A^{III}V^V.

Авторы выражают благодарность проф. Д. Н. Наследову за поддержку настоящей работы.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе
Академии наук СССР

Поступило
15 I 1965

Институт прикладной физики
Академии наук МССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ А. А. Вайполин, Ф. М. Гашимзаде и др., Изв. АН СССР, сер. физ., 28, № 6, 1085 (1964). ² Ф. М. Гашимзаде, Физ. тверд. тела, 5, 1199 (1963); Изв. АН Азерб.ССР, сер. физ.-матем. и техн. наук, № 3, 67 (1963). ³ J. Таус, А. Абрахам, J. Phys. Chem. Solids, 20, 190 (1964). ⁴ М. Cardona, D. L. Greenaway, Phys. Rev., 125, 1291 (1962). ⁵ Н. R. Philipp, E. A. Taft, Phys. Rev., 127, 159 (1962). ⁶ В. В. Соболев, Автореферат диссерт., Гос. опт. инст. им. С. И. Вавилова, Л., 1962. ⁷ В. В. Соболев, Физ. тверд. тела, 6, 3124 (1964); ДАН, 151, 1308 (1963); 152, 1342 (1963); оптика и спектроскопия, 16, 1, 76 (1964). ⁸ Ф. П. Кесаманлы, Д. Н. Наследов, Ю. В. Рудь, Физ. тверд. тела, 6, 2187 (1964); Ф. П. Кесаманлы, Ю. В. Рудь, С. В. Слободчиков, ДАН, 161, № 5 (1965); А. А. Вайполин, Н. А. Горюнова и др., ДАН, 154, 1116 (1964).