

два катиона A и B . При хаотическом распределении катионов A и B в катионной подрешетке образуется структура сфалерита, в случае их упорядочения, возникает структура халькопирита. Следствием упорядочения катионов A и B является возникновение тетрагонального искажения. Элементарная ячейка халькопирита имеет удвоенный по сравнению с кубической решеткой сфалерита параметр решетки вдоль оси c . В идеальной тетрагональной ячейке халькопирита осевое отношение c/a равно 2. Однако из-за различия размеров двух типов катионов в кристалле возникают два типа анионных тетраэдров, центрированных катионами большего и меньшего размеров. В результате кристаллическая решетка трехкомпонентных соединений $A^1B^3C^6$ приобретает дополнительное тетрагональное искажение, определяемое параметром $\delta=2-(c/a)$. В нашем случае тетрагональное искажение кристаллической решетки соединения $CuIn_3Se_5$ $\delta=0,005$.

ВЫВОДЫ

Методом направленной кристаллизации расплава выращены монокристаллы $CuIn_3Se_5$. Согласно данным химического анализа состав выращенных монокристаллов соответствует формульному. При помощи рентгеноструктурных ис-

следований определены параметры кристаллической решетки соединения $CuIn_3Se_5$. Установлено, что $CuIn_3Se_5$ кристаллизуется в тетрагональную структуру типа халькопирита с параметрами элементарной ячейки $a=0,57557$ нм и $c=1,1514$ нм при комнатной температуре.

Искренне благодарю заведующего кафедрой химии Белорусского государственного университета информатики и электроники, доктора химических наук Боднаря И.В., за доверие самостоятельно представить результаты исследований, старшего научного сотрудника Института физики твердого тела и полупроводников АН Республики Беларусь, кандидата физико-математических наук Орлову Н.С. – за помощь в проведении измерений, заведующего кафедрой физики Брестского государственного технического университета, кандидата физико-математических наук Гладышука А.А. – за понимание и поддержку.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Marin G., Taulrigne S., Guevara R., Delgado J.M. et.al. Inst. Phys. Conf. Ser. N 152, Sect. D. 1997. Proc. 11th ICTMC-11. P.573-577.
2. Honle W., Kuhn G., Boence U.-C. Cryst. Res. Technol. 1988. V.23. P.1347-1354.

УДК 535.337

Ракович Ю.П., Смаль А.С.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ СВОБОДНЫХ ЭКСИТОНОВ И ПОЛЯРИТОНОВ С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

Для эффективного развития технологии оптоэлектронных устройств на основе монокристаллов A_2B_6 требуется точное знание оптических параметров свободных экситонов и в первую очередь надежное определение резонансной частоты в широком интервале температур. Коэффициент поглощения монокристаллов A_2B_6 в области экситонного резонанса достигает 10^4-10^5 см⁻¹ [1] и для прямого определения экситонных параметров из спектров поглощения требуются тонкие монокристаллические пленки высокого качества, выращивание которых сопряжено со значительными трудностями. Поэтому чаще всего для изучения энергетической структуры полупроводниковых кристаллов используют анализ их спектров отражения, которые сильно зависят от состояния поверхности и в ряде случаев обнаруживают аномалии в виде дополнительных пиков [2,3]. В такой ситуации подходы, когда для оценки резонансной энергии E_0 свободных экситонов оперируют просто положением минимумов или максимумов спектров экситонного отражения (ЭО) [4,5], или же выбирают E_0 посередине экспериментально измеренного контура $R(E)$ [6,7], не могут обеспечить достаточной точности. Нельзя считать надежным и определение спектрального положения экситонного резонанса из расчета мнимой части диэлектрической постоянной с помощью классических соотношений Крамерса-Кронига [8], так как есть основания полагать, что в области экситонного резонанса они не выполняются [9].

Для анализа спектров монокристаллов A_2B_6 в области экситонного резонанса наибольшее распространение получил

метод подгонки вычисляемых по формулам Френеля кривых ЭО к экспериментальным спектрам [3,10]. Таким методом можно оценить все основные параметры свободных экситонов: затухание Γ , фоновую диэлектрическую проницаемость ϵ , резонансную энергию экситонного осциллятора, поляризуемость $4\pi\alpha$ (либо продольно-поперечное расщепление Δ_{LT}), проследить их изменение под влиянием различных внешних воздействий. Влияние поверхности можно учесть введением приповерхностного безэкситонного («мертвого») слоя [11], наличие которого приводит к интерференционным эффектам [3,12] и трансформации контура полосы отражения. Электрические поля поверхностных состояний или дефектов могут вызвать значительное увеличение глубины мертвого слоя d [3,11], а температурная перезарядка дефектов – изменение величины d с температурой.

Несмотря на то, что в ряде случаев такой подход не дает удовлетворительного согласия с экспериментом [2], модель мертвого слоя до сих пор остается чрезвычайно популярной, так как позволяет довольно просто рассчитывать спектры ЭО. Для объяснения многообразия спектров отражения были предложены также несколько моделей, основанных на линейной [12] или экспоненциальной [13] зависимости резонансной энергии экситона от координаты $z < d$, которые постулировались, исходя из возможности аналитического рассмотрения. Однако при этом природа «мертвого» слоя и его связь с приповерхностной областью пространственного заряда (ОПЗ) оставалась не выясненной.

Ракович Юрий Петрович. К. ф.-м. н., доцент каф. физики Брестского государственного технического университета.

Смаль Александр Сергеевич. Старший преподаватель каф. АТПиП Брестского государственного технического университета.

Беларусь, БГТУ, 224017, г. Брест, ул. Московская 267.

Физика, математика, химия

В настоящей статье представлен расчет спектров отражения монокристаллов A_2B_6 свободных экситонов (на примере $ZnSe$) как в приближении «мертвого слоя», так и с использованием многослойной аппроксимации приповерхностной области [14] с учетом сдвига резонансной энергии и увеличения затухания экситона в электрическом поле поверхностного заряда. Результаты расчета сопоставлены с экспериментальным спектром отражения $ZnSe$ эпитаксиальных слоев.

1. УЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

Возбуждение дипольно-активного экситона сопровождается возникновением поляризации среды $P(\mathbf{R}, \omega)$, удовлетворяющей уравнению [15]

$$B(\nabla_{\mathbf{R}}^2 + q^2(\omega)) P(\mathbf{R}, \omega) = -\alpha E(\mathbf{R}, \omega), \quad (1)$$

где $B = \hbar \omega / M$, $\alpha = (2\pi)^{-1} \omega_0 \omega \epsilon_0$, $q^2 = -B^{-1}(\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma)$. Здесь ω_0 – резонансная частота (частота механического экситона при $\mathbf{E}=0$); Γ – константа затухания механического экситона; ϵ_0 – фоновая диэлектрическая проницаемость, определяемая другими возбуждениями кристалла. Правая часть уравнения (1) содержит вектор электрического поля, сопровождающего экситон. Силу, действующую в электрическом поле на механический экситон, можно рассматривать как вынуждающую силу. Вывод уравнения (1) был предложен Пекаром [15]. Уравнение (1) является материальным уравнением, учитывающим поляризацию среды, и дополняет систему уравнений Максвелла для полей. Для однородной среды можно воспользоваться преобразованием Фурье, написав (в случае изотропной среды) следующее из (1) соотношение, например в виде

$$P(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4\pi} [\epsilon(\mathbf{k}, \omega) - \epsilon_0] E(\mathbf{k}, \omega), \quad (2)$$

причем диэлектрическая проницаемость $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ имеет вид

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_0(\omega) - \frac{4\pi\alpha}{\omega^2 - \omega_0^2 - Bk^2 + i\omega\Gamma}. \quad (3)$$

Для реальных экситонов (поляритонов) поле имеет только поперечную часть $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$, для которой уравнения Максвелла дают следующую связь с \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = \frac{c^2 k^2}{\omega^2} \mathbf{E}. \quad (4)$$

Решая (4) совместно с (2) и учитывая что индукция $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$, получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = \frac{c^2 k^2}{\omega^2}. \quad (5)$$

Удобно разрешить это уравнение относительно \mathbf{k} или n ($n = c\mathbf{k}/\omega$ – показатель преломления, \mathbf{k} – волновое число). В результате получаем формулу Пекара [15], описывающую поляритонную дисперсию

$$n_{1,2}(\omega) = \sqrt{\epsilon_0 + \frac{1}{2} \left(a \pm \sqrt{a^2 + b} \right)}, \quad (6)$$

где

$$a = \frac{M c^2}{\hbar \omega_{0j} \omega^2} (\omega^2 - \omega_{0j}^2 + i\omega\Gamma_j) - \epsilon_0;$$

$$b = 8 \frac{M c^2 \epsilon_0 \omega_{0j}}{\hbar \omega^2}.$$

Для расчета спектра отражения без учета пространственной дисперсии показатель преломления соответствовал модели классического экситонного осциллятора:

$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon_0 + \frac{4\pi\alpha\omega_{0j}^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j}}. \quad (7)$$

где ω_{0j}, Γ_j – резонансная частота и параметр затухания j -того слоя соответственно, ϵ – фоновая диэлектрическая постоянная.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ.

Для расчета спектров отражения использовался матричный метод расчета многослойных поглощающих структур [16]. При заданном поверхностном потенциале область пространственного заряда L разбивалась на некоторое количество однородных слоев одинаковой толщины d . Каждому j -тому слою сопоставлялась так называемая «матрица преломления»

$$I_j = \frac{1}{t_{j(j-1)}} \begin{bmatrix} I & r_{j(j-1)} \\ r_{j(j-1)} & I \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где $t_{j(j-1)}, r_{j(j-1)}$ – коэффициенты Френеля пропускания и отражения соответственно, которые вычисляются в предположении, что j -тая граница раздела образована двумя полубесконечными средами, а свет распространяется из среды j в $j-1$ -ю. А также матрица F_j (называемая фазовой матрицей j -того слоя), устанавливающая связь между тангенциальными составляющими светового вектора \mathbf{E} прямой и обратной волны на внутренних границах j -того слоя:

$$F_j = \begin{bmatrix} e^{i\delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_j} \end{bmatrix}, \quad (9)$$

где $\delta_j = 2\pi(d/\lambda)n_j$ – сдвиг фазы, приобретаемой волной при прохождении через j -й слой, λ – длина волны, n_j – в общем случае комплексный показатель преломления j -того слоя.

Коэффициент отражения вычислялся по формуле

$$R = \left\| \frac{S_{21}}{S_{11}} \right\|^2, \quad (10)$$

где S_{11}, S_{21} элементы первого столбца матрицы

$$S = I_{M+1} F_M I_M \dots F_1 I_1, \quad (11)$$

которая называется матрицей рассеяния.

Показатель преломления j -того слоя в модели с учетом пространственной дисперсии рассчитывался по формуле (6), без учета пространственной дисперсии – (7).

В соответствии с многослойной моделью ОПЗ непрерывное распределение поля и потенциала у поверхности кристалла заменялось ступенчатым с шириной ступеньки d и предполагалась линейная зависимость поля [17].

3. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

На рис.1 представлены рассчитанный и экспериментальный спектры экситонного отражения эпитаксиального слоя $ZnSe$, толщиной 2 мкм, выращенного на подложке из арсенида галлия. В результате фитинга были получены следующие параметры: резонансная энергия свободного экситона – $E_0 = 2.7927$ эВ, параметр затухания в объеме слоя $ZnSe$ –

$\hbar\Gamma_0 = 2.3$ мэВ, величина поверхностного электрического поля $F_S = 38.41$ кВ/см и толщина ОПЗ $L = 116$ нм.

Характерной особенностью данного спектра является наличие дополнительного пика (так называемого «спайка») в области 2.7930 эВ. Следует отметить, что спайк в нашем расчете появляется при разумных значениях объемного затуха-

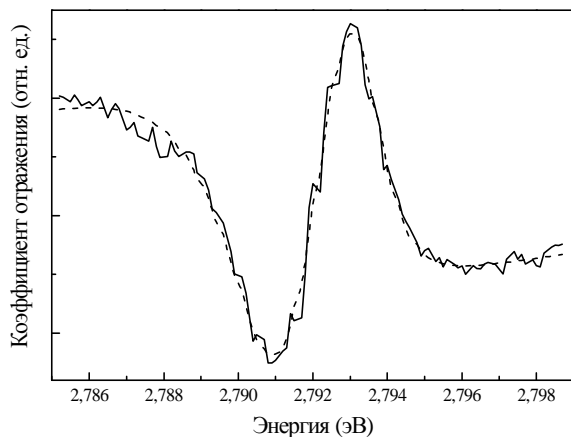


Рисунок 1. Экспериментальный (сплошная линия) и рассчитанный (штриховая) контуры полосы экситонного отражения **ZnSe** при 80К

ния $\hbar\Gamma_0$. Вместе с тем, такая форма экситонного спектра представляет собой большую трудность объяснения в рамках модели однородного мертвого слоя, так как требует значительно меньших ($\sim 10^{-5}$ эВ) значений затухания экситона [11].

Наблюдаемое согласие между результатами расчета и эксперимента свидетельствует о справедливости использованной многослойной модели ОПЗ с параметрами свободного

экситона, зависящими от величины поверхностного электрического поля [17]. Тот факт, что для проявления левого слайка не требуется слишком малого затухания, делает рассматриваемый механизм более реальным, чем механизм, описанный в [11]. В частности, разрешается противоречие между значениями Γ , получаемыми из исследований отражения и люминесценции [18].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. V.P.Gribkovskii, L.G.Zimin, S.V.Gaponenko et al. *Phys.stat.sol. (b)*, **158** (1990) 359
2. М.С.Бородин, П.С.Кособуцкий, С.Г.Шевель. *ФТТ*, **21** (1979) 2510
3. Б.В.Новиков, Г.Роппишер, В.Г.Талалаев. *ФТТ*, **3** (1979) 817
4. В.В.Соболев, В.И.Донецких, Е.Ф.Загайнов. *ФТП*, **12** (1978) 1089
5. S.Satoh, K.Igahi. *Jap.J. of Appl. Phys.*, **19** (1980) 1953
6. Е.Ф.Гросс, С.А.Пермогоров, А.Н.Резницкий, Е.Н.Усаров. *Проблемы физики соединений A_2B_6* . Вильнюс. (1972) 38
7. Г.Роппишер, Б.В.Новиков, И.Якобс. *ФТП*, **17** (1975) 2178
8. Б.Сегалл *Труды IX Международной конференции по физике полупроводников*, М. (1968) 450
9. М.И.Страшников. *ФТТ*, **17** (1975) 729
10. К.А.Дмитриенко, Л.В.Тараненко, С.Г.Шевель, А.В.Маринченко. *ФТП*, **19** (1985) 788
11. J.J.Hopfield, D.G.Thomas. *Phys.Rev.*, **132** (1963) 563
12. В.И.Сугаков, В.Н.Хотяинцев. *ЖЭТФ*, **70** (1976) 1566
13. Э.Г.Скайтис, В.Н.Хотяинцев. *ФТТ*, **24** (1982) 3648
14. В.А.Киселев. *ФТТ*, **21** (1979) 1069
15. С.И.Пекар. *ЖЭТФ*, **33** (1957) 1022
16. Л.М.Бреховских. *Волны в слоистых средах*. М., (1973) С.502
17. Yu.P.Rakovich, L.Bryja, M.Ciorga, J.Misiewicz, M.Heuken, K.Heime, G.P.Yablonskii. *Thin Solid Films* **364** (2000) 287.
18. Г.В.Бенеманская, Б.В.Новиков, А.Е.Чередниченко *ФТТ* **19** (1977) 1389.

УДК 621.378

Русаков К.И., Паращук В.В.

ВОЛНОВОДНЫЕ СВОЙСТВА СТРИМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЛАЗЕРОВ

Стримерные лазеры, в которых накачка осуществляется при неполном электрическом пробое полупроводников, являются приборами с уникальными характеристиками. В условиях сильного возбуждения полупроводников стримерными разрядами концентрация неравновесных носителей заряда в канале стримера достигает $\sim 10^{20}$ см⁻³, а интенсивность свечения — величин порядка $10^9 \div 10^{12}$ Вт/см² [1]. При столь сильном возбуждении полупроводника становятся возможными различные нелинейные процессы, в том числе и эффекты самовоздействия. Ранее авторами была показана возможность режима самоканалирования излучения, позволяющего объяснить нитевидную форму стримерного разряда, получен критерий самоканалирования в квазиоптическом приближении и определен радиус волноводного канала [2]. Однако до настоящего времени практически не обсуждалось влияние нерав-

новесных носителей на параметры волноводного канала, поэтому в данной работе проведен анализ возможных механизмов формирования оптического волновода в стримерном лазере с учетом данного процесса.

Одной из особенностей стримерных лазеров является существенная оптическая нелинейность рабочей полупроводниковой среды, обеспечивающей самоканалирование излучения вследствие нелинейной рефракции. К механизмам нелинейной рефракции на рабочих частотах стримерных лазеров, т.е. на краю собственного поглощения, относятся влияние свободных носителей на показатель преломления и влияние интенсивности излучения на их концентрацию. В других частотных диапазонах механизмы нелинейности могут быть другими (взаимодействие с плазмонами, эффект Штарка), но эти процессы мы рассматривать не будем.

Эффекты нелинейной восприимчивости третьего порядка

Русаков Константин Иванович. Доцент каф. физики Брестского государственного технического университета. Беларусь, БГТУ, 224017, г. Брест, ул. Московская 267.

Паращук Валентин Владимирович. Старший научный сотрудник института физики им. Б.И. Степанова Национальной Академии Наук Беларуси.