

В.В. Івченко¹, О.В. Дворник²

Вплив одновісного механічного напруження на кристалічне розщеплення вершини валентної зони у сполуках $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$

¹Херсонський державний морський інститут, 73000, Україна, м. Херсон, вул. Ушакова, 20;

²Херсонський національний технічний університет,
73008, Україна, м. Херсон, Бериславське шосе 24, корп. 1, e-mail: olga_dvornik@mail.ru

Досліджено залежність розщеплення кристалічного поля вершини валентної зони при одновісному механічному напруженні для кристалів $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$. Показано, що величина розщеплення квадратично змінюється при механічному напруженні без зміни знаку для фосфідів, тоді як для арсенідів зміна знака має місце. Також розглянуто вплив одновісного механічного напруження на густину станів на рівні Фермі і сплюснення зони важких дірок.

Ключові слова: зонна структура, кристалічне розщеплення, густина станів, механічне напруження, сполуки $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$.

Стаття постуила до редакції 14.12.2010; прийнята до друку 15.06.2011.

Вступ

Монокристалічні нанотрубки сполук $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ відрізняються низькою вартістю виробництва і є перспективними для застосування в оптоелектроніці та детектування довгохвильового електромагнітного випромінювання [1, 2], що є причиною поновлення інтересу до вказаних сполук в останні роки.

У впорядкованих модифікаціях кристалів $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ зниження симетрії від кубічної до тетрагональної призводить до зняття виродження валентної зони Γ_{15} ($\Gamma_{15} \rightarrow \Gamma_1 \oplus \Gamma_5$). Величина і знак енергетичного зазору $\delta = \varepsilon(\Gamma_5) - \varepsilon(\Gamma_1)$ визначається ступенем упорядкування стехіометричних вакансій, локальною дисторсією кристалічної решітки а також невеликою тетрагональною деформацією [3].

Метою статті є дослідження співвідношення між параметром розщеплення кристалічного поля δ і величиною одновісного механічного напруження для цього класу матеріалів.

І. Теорія та висновки

Згідно з [3] величина δ визначається наступним виразом:

$$d = d_S + 2b(h-1)(1+n) \left[1 + \frac{b(h-1)(1+n)}{\Delta} \right], \quad (1)$$

де d_S – незалежна від тетрагональної деформації частина параметра d , b – деформаційний потенціал ідеальної кубічної структури, h – показник тетрагональної деформації решітки ($h = c/2a$ для C_{4u} кристалічного класу і $h = c/(a\sqrt{2})$ для D_{4h} ; a , c – сталі решітки), n – коефіцієнт Пуасона, Δ – параметр спин-орбітального розщеплення. Числові значення параметрів b , n , Δ (взяті з публікацій [3, 5–12]), а також d_S для різних сполук класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ наведені в таблиці. Параметри d і d_S розраховано за допомогою виразу (1) та експериментальних даних [3, 5–12].

Під дією механічного напруження паралельного осі c [4]:

$$h = h_0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{3}{E} - \frac{K}{3} \right) X \right], \quad (2)$$

де h_0 – показник тетрагональної деформації решітки у відсутності механічного напруження; E , K – модулі Юнга і стиску відповідно (таблиця). З виразів (1), (2) слідує, що врахування поперечного розтягання призводить до зміни залежності $d(X)$ від лінійної

Таблиця

Матеріал	b, eВ	v	η_0	Δ , eВ	δ_s , eВ	E, ГПа	K, ГПа ⁻¹
Zn ₃ P ₂	3.51 ^a	0.474 ^a	0.9973 ^b	0.14 ^b	0.085	98 [*]	0.009 [*]
Cd ₃ P ₂	2.62 ^a	0.457 ^a	0.9911 ^b	0.14 ^г	0.085	81 [*]	0.016 [*]
Zn ₃ As ₂	3.32 ^a	0.463 ^a	1.003525 ^b	0.265 ^д	0.049	54 [*]	0.017 [*]
Cd ₃ As ₂	2.30 ^a	0.454 ^a	1.005648 ^b	0.31 ^е	0.07	49 [*]	0.019 [*]

Примітка:

^a за даними [5]; ^b за даними [15] і [16]; ^b усереднено за даними [6] і [7]; ^г усереднено за даними [6], [8] і [9]; ^д розраховано за даними [10]; ^е за даними [11]; ^{*} за даними [12].

[4] до квадратичної.

На рис. 1 показані теоретичні залежності $d(X)$ розраховані для різних сполук A_3B_2 за формулами (1), (2). Видно, що для фосфідів параметр d змінюється залежно від механічного напруження без зміни знаку, тоді як для арсенідів така зміна знака параметра має місце. Така особливість у порядку розташування енергетичних рівнів може виявлятися у спектрах оптичного поглинання [7, 10, 13].

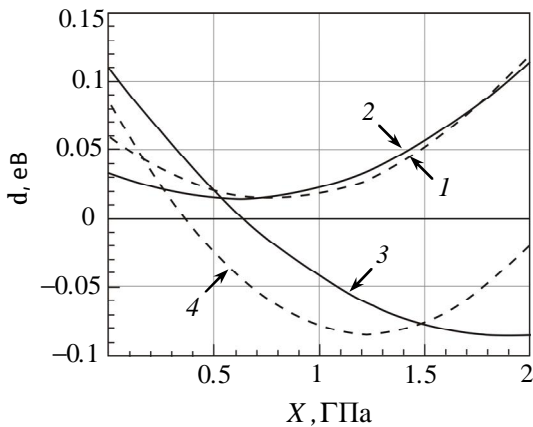


Рис. 1. Залежність параметру δ від одновісного механічного напруження X сполук: 1 – Zn₃P₂; 2 – Cd₃P₂; 3 – Cd₃As₂; 4 – Zn₃As₂.

Розглянемо тепер два інших ефекти – зміну густини станів (g) на рівні Фермі (e_F) і сплюснення валентної зони важких дірок у випадку одновісного механічного напруження. Останнє може бути пояснено наступним чином. Дисперсійне рівняння для шуканих енергій актуальних зон модифікацій з центром симетрії у довіклілі точки Γ має вигляд [14]:

$$g(e) = f_1(e)(k_x^2 + k_y^2) + f_2(e)k_z^2, \quad (3)$$

$$g(e) = e(e - e_g) \left[(e + (2/3)\Delta)(e + d + (1/3)\Delta) - (2/9)h^{-2}\Delta^2 \right] \quad (4)$$

$$f_1(e) = P^2 \left[(e + (1/3)\Delta)(e + d + (1/3)\Delta) - (1/9)h^{-2}\Delta^2 \right] \quad (5)$$

$$f_2(e) = h^{-4}P^2 e(e + (2/3)\Delta) \quad (6)$$

де e_g – оптичний енергетичний зазор, P – міжзонний матричний елемент квазіімпульсу.

Якщо $d = \Delta(1 - h^2)/3h^2$ то $e = 0$ буде рішенням (3) і відповідає плоскій у всіх напрямках зоні важких дірок. Для Cd₃As₂ такий ефект виявлятиметься при $X = 0.62$ ГПа, для Zn₃As₂ при $X = 0.36$ ГПа. У випадку $h = 1$ рішення $e = 0$ буде подвійним коренем рівняння (3) при $k = 0$ і відповідає виродженню валентних зон важких і легких дірок у точці Γ (рівні із симетрією Γ_7 і Γ_6). Для Cd₃As₂ цей ефект виявляється при $X = 0.20$ ГПа, для Zn₃As₂ при $X = 0.14$ ГПа. Для фосфідів такий ефект є відсутнім.

Для зони провідності Cd₃As₂ густина станів [15]:

$$g(e_F) = \frac{\partial}{\partial e} \left(\frac{g}{3p^2 f_1} \sqrt{\frac{g}{f_2}} \right)_{e=e_F} \quad (7)$$

При низьких температурах ϵ_F можна визначити з рівняння:

$$n = \int_0^{e_F} g(e) de \quad (8)$$

де n – електронна концентрація.

Для числових розрахунків використано наступні значення зонних параметрів Cd₃As₂: $e_g = -0.1$ eВ [17], $P = 7.4 \cdot 10^{-10}$ eВ·м [18]. Аналогічно авторам [4], враховано зміну енергетичного зонного зазору, обумовлену гідростатичною компонентою

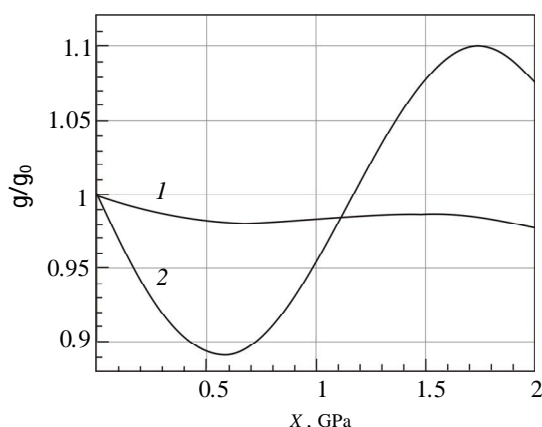


Рис. 2. Залежність $g(X)$ для двох концентрацій Cd_3As_2 . 1 – $n = 10^{24} \text{ м}^{-3}$; 2 – $n = 10^{23} \text{ м}^{-3}$. g_0 – величина g за відсутності механічного напруження.

механічного напруження: $de_g/dX = (1/3)de_g/dP$, де $de_g/dP = 57 \text{ мВ/ГПа}$ – коефіцієнт гідростатичного тиску енергетичного зазору [4].

Розрахункова залежність $g(X)$ для двох різних електронних концентрацій Cd_3As_2 представлена на рис. 2. Складна поведінка залежності $g(X)$ (особливо помітна для низьких концентрацій), як і ефективної маси густини станів на рівні Фермі, обумовлена квадратичною залежністю $d(X)$.

Івченко В.В. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри;
Дворник О.В. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри.

- [1] M. Omari, N. Kouklin, G. Lu, J. Chen, M. Gajdardziska-Josifovska. Fabrication of Cd_3As_2 nanowires by direct vapor-solid growth, and their infrared absorption properties // *Nanotechnology*, **19**(10), 105301 (2008).
- [2] G. Shen, Y. Bando, C. Ye, X. Yuan, T. Sekiguchi, D. Goldberg. Single-Crystal Nanotubes of III-V Semiconductors // *Angewandte Chemie*, **118**(45), 7730 (2006).
- [3] Г.П. Чуйко, О.В. Дворник. Зв'язок між кристалічним розщепленням валентних зон та тетрагональною деформацією ґратки для сполук $A_3^{II}B_2^V$ // *Фізика і хімія твердого тіла*, **3**(4), 682 (2002).
- [4] J. Cisowski, J.C. Portal. Strain effect on the crystal-field splitting in Cd_3As_2 // *Acta Phys. Pol.*, **A69**, 867 (1986).
- [5] Г.П. Чуйко, Н.М. Чуйко. К вопросу о зонной структуре Zn_3P_2 и Zn_3P_2 в центре зоны Бриллюэна // *ФТП*, **15**(7), 1279 (1981).
- [6] J. Cisowski. Level ordering in $II_3 - V_2$ semiconducting compounds // *Phys. Status Solidi*, **b111**, 289 (1982).
- [7] J.M. Pawlikowski. Absorption edge of Zn_3P_2 // *Physical Review*, **B26**, 4711 (1982).
- [8] M.J. Gelten, A. van Lieshout, C. van Es, F.A.P. Blom. Optical properties of Cd_3P_2 // *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **11**, 227 (1978).
- [9] J. Cisowski, J.C. Portal, J.M. Broto, E.K. Arushanov, K. Kloc, A. Burian. The conduction band of Cd_3P_2 from the Shubnikov-de Haas effect // *Acta Phys. Pol.*, **A67**, 475 (1985).
- [10] B. Sujak-Cyrul, B. Kolodka, J. Misiewicz, J. Pawlikowski. Intraband and Interband Optical transitions in Zn_3As_2 // *J. Phys. Chem. Solids*, **43**, 1045 (1982).
- [11] V. Dowgiallo-Plenkiewicz and P. Plenkiewicz. Spin-Orbit and Crystal Field Splittings of the Valence Band in II_3V_2 Semiconducting Compounds // *Phys. Stat. Sol.*, **B87**(2), 309 (1978).
- [12] И.Б. Лазарев, В.Я. Шевченко, С.Ф. Маренкин. Физико-химические свойства и применение полупроводниковых соединений систем $A^{II}-B^V$ // *Изв. АН СССР, Сер. Неорг. Мат.*, **15**(10), 1701 (1979).
- [13] В.В. Івченко, О.М. Сергеев, В.С. Єльнік, Н.М. Чуйко. Край поглинання арсеніду кадмію // *Фізика і хімія твердого тіла*, **4**, 673 (2003).
- [14] G.P. Chuiko, O.V. Dvornik. Features of main band parameters for crystalline modification of Cd_3As_2 without center of symmetry // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, **10**(4), 31 (2007).
- [15] Г.П. Чуйко, Н.М. Чуйко, О.В. Дворник. Густини станів та ефективні маси в межах узагальненої моделі Кілдал (на прикладі Cd_3P_2) // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(1), 96 (2004).
- [16] Г.П. Чуйко, О.В. Дворник. Статистичний аналіз параметру тетрагональної деформації сполук $A_3^{II}B_2^V$ // *Тез. докл. 3-й Межд. научно-практич. конф. по материалам электронной техники (Кременчуг, Украина, 2008)* с. 71.

- [17] А.И. Козлов, В.В. Соболев, А.Ф. Князев. Спектры отражения двух полиморфных модификаций арсенида кадмия // *ФТП*, 39(3), 305(2005).
- [18] J.J. Neve. The Shubnikov-de Haas effect in Cd_3As_2 and $(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x)_3\text{As}_2$. Ph.D Thesis, Proefschrift, Eindhoven, Eindhoven Technical Univ, 1984.

V.V. Ivchenko¹, O.V. Dvornyk²

Strain Effect On The Crystal-Field Splitting Of Valence Band In $\text{A}_3^{\text{II}}\text{B}_2^{\text{V}}$ Compounds

¹*Kherson State Maritime Institute, 73008, Ukraine, Kherson, Ushakov st., 20;*

²*Kherson National Technical University, 73008, Ukraine, Kherson, Berislavske shosse, 24, e-mail: olga_dvornik@mail.ru*

The dependence of crystal-field splitting of the valence band top from the uniaxial stress for $\text{A}_3^{\text{II}}\text{B}_2^{\text{V}}$ crystals has been investigated. It is shown that this value varies under the stress without the change of sign for the phosphides whereas for the arsenides such an inversion of the sign takes place. The effect of external strain on the density of states and the flattening of the heavy-hole valence band are also discussed.