

ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ, ΠΙΕΣΗΣ, ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΔΙΕΓΕΡΣΗΣ ΚΑΙ ΠΙΕΖΟΗΛΕΚΤΡΙΚΩΝ ΠΕΔΙΩΝ, ΣΤΑ ΦΑΣΜΑΤΑ RAMAN ΤΟΥ CdTe

B.X. ΣΤΕΡΓΙΟΥ¹, Γ.Σ. ΡΑΠΤΗΣ¹, Ν. ΠΕΛΕΚΑΝΟΣ²

¹Τομέας Φυσικής, Σχολή Εφαρμ. Μαθ. & Φυσ. Επιστημών, Ε.Μ.Π.

²Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Laser, ΙΤΕ, Κρήτη



Επίδραση της Θερμοκρασίας

ΣΥΧΝΟΤΗΤΑ ΦΩΝΟΝΙΩΝ

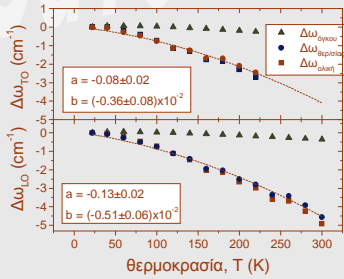
Η εξάρτηση $\omega = \omega(T)$ αποδίδεται σε:

- διάσπαση των φωνονίων από το κέντρο της BZ σε άλλα φωνόνια με άθροισμα κυματοανυμάτων μηδέν και άθροισμα συχνότητων όσο και η αρχική συχνότητα, (άμεσο φαινόμενο)
- επίδραση φαινομένων όγκου, λόγω διαστολής του υλικού (έμμεσο φαινόμενο)

$$\Delta\omega_{\text{ολ}}(T) = \Delta\omega_{\text{θερμ}}(T) + \Delta\omega_{\text{όγκου}}(T)$$

$$\text{όπου } \Delta\omega_{\text{όγκου}}(T) = -\int_0^T \frac{\beta}{\kappa} \left(\frac{\partial\omega}{\partial P} \right)_T dT \text{ και}$$

$$\Delta\omega_{\text{θερμ}}(T) = a \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + b \left[\left(n_3 + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{12} \right] - \frac{3a+2b}{6}$$



β : συντελεστής θερμικής διαστολής όγκου

κ : συμπεστικότητα όγκου

n_2, n_3 : στατιστικοί παράγοντες Bose-Einstein των φωνονίων στις συχνότητες $\omega/2$ και $\omega/3$ ($\omega_0 = \omega(0)$)

a, b : σταθερές οι οποίες αντιπροσωπεύουν τις συνεισφορές στο $\Delta\omega_{\text{θερμ}}(T)$ από διασπάσεις σε δύο ή τρία φωνόνια αντίστοιχα, με $\omega/2$ και $\omega/3$

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Ασήμαντη η συνεισφορά του όγκου στη μεταβολή συχνότητας, παρά τον πολικό χαρακτήρα του υλικού.

ΕΥΡΟΣ ΦΩΝΟΝΙΩΝ

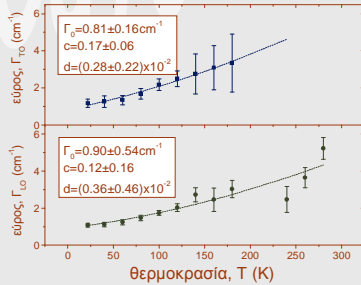
Προσαρμογή με:

$$\Gamma(T) = \Gamma_0 + c \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + d \left[\left(n_3 + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{12} \right]$$

n_2, n_3 : στατιστικοί παράγοντες Bose-Einstein των φωνονίων στις συχνότητες $\omega/2$ και $\omega/3$ ($\omega_0 = \omega(0)$)

c, d : σταθερές οι οποίες αντιπροσωπεύουν τις συνεισφορές στο $\Gamma(T)$ από διασπάσεις σε δύο ή τρία φωνόνια αντίστοιχα, με $\omega/2$ και $\omega/3$

Γ_0 : σταθερά που δηλώνει ένα παραμένον εύρος λόγω πλεγμάτων ατελειών



ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Ίδιας τάξης μεγέθους (~4%) σχετική συνεισφορά των διαδικασιών διάσπασης σε 2 φωνόνια ως προς τη συνεισφορά από τις διασπάσεις σε 3 φωνόνια, σε όλα τα αναρμονικά φαινόμενα (μεταβολή συχνότητας, μεταβολή εύρους).

Συντελεστής Faust-Henry

- εκφράζει το λόγο των πλεγμάτων προς τις ηλεκτρονικές συνεισφορές στο γραμμικό ηλεκτροοπτικό τανυστή
- υπολογίζεται από τα φάσματα Raman μέσω του λόγου των εντάσεων ($\rho_{\text{περ}}$) των φωνονίων LO (πλεγμιακές και ηλεκτρονικές συνεισφορές) προς TO (πλεγμιακές συνεισφορές)

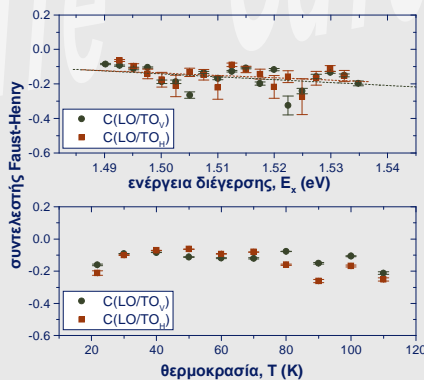
$$C = \left(\frac{\omega_{\text{LO}}^2 - \omega_{\text{TO}}^2}{\omega_{\text{TO}}^2} \right) \left\{ 1 - \left[\frac{n_{\text{TO}} + 1}{n_{\text{LO}} + 1} \right] \left(\frac{\omega_{\text{LO}}^S}{\omega_{\text{LO}}^S} \right)^4 \left(\frac{\omega_{\text{LO}}}{\omega_{\text{TO}}} \right) \left(\frac{\rho_{\text{περ}}}{\rho_{\text{εωρ}}} \right) \right\}^{1/2} - 1$$

$\omega_{\text{LO,TO}}$: συχνότητες Raman των φωνονίων LO, TO

$\omega_{\text{LO,TO}}^S$: απόλυτες συχνότητες Stokes

$n_{\text{LO,TO}}$: αντίστοιχοι παράγοντες Bose-Einstein

$\rho_{\text{εωρ}}$: λόγος των εντάσεων LO/TO λόγω κανόνων επιλογής



ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ: i) Αρνητική τιμή του συντελεστή Faust-Henry (σε συμφωνία με θεωρητικές προβλέψεις για τα περισσότερα υλικά II-VI. ii) Μικρή διακύμανση για την περιοχή 1.49-1.54 eV (κάτω από το ενεργειακό χάσμα - $E_g = 1.591 \text{ eV}$ στους 20K), άρα σχεδόν σταθερή σχετική συνεισφορά πλέγματος-ηλεκτρονίων στη διηλεκτρική συνάρτηση. iii) Μια ενδεικτική τιμή του C σε αυτή την περιοχή ενεργειών είναι $C \sim -0.14 \pm 0.12$.

Επίδραση της Πίεσης

ΚΒΑΝΤΙΚΑ ΠΗΓΑΔΙΑ CdTe/CdₓZn₁₋ₓTe:

- Ψευδομορφική (σύμφωνη) ανάπτυξη λόγω υποκρίσιμου πάχους των πηγαδίων CdTe.
- Η, κάθετη στην διεύθυνση ανάπτυξης, ελαστική παραμόρφωση των πηγαδίων εξαρτάται από τις πλεγμιακές σταθερές του συμπαγούς υλικού (a_0) και του φράγματος (a_b), $\epsilon'_1 = \epsilon'_2 = \epsilon_{\parallel} = (a_0 - a_b) / a_0$ (μοντέλο δίοτροπικής παραμόρφωσης).
- Η χαρακτηριστική εξίσωση οδηγεί σε απλά (s) και διπλά (d) εκφυλισμένα φωνόνια με μετατοπίσεις ως προς τη συχνότητα αδιατάραχτου πλέγματος ω_0 .

Ανάπτυξη παράλληλα στη διεύθυνση [001]:
 $\Delta\Omega_{\pm}^{\text{LO}} = \omega_0 (\epsilon_{\parallel} \tilde{K}_{12}^{\text{LO}} + \epsilon_{\perp} \tilde{K}_{11}^{\text{LO}} / 2)$
 όπου $\epsilon_{\perp} = \epsilon'_3 = -2 \epsilon_{\parallel} C_{12} / C_{11}$

Ανάπτυξη παράλληλα στη διεύθυνση [111]:

$$\Delta\Omega_{\pm}^{\text{LO}} = \omega_0 \left[\frac{1}{3} (\tilde{K}_{11}^{\text{LO}} + 2\tilde{K}_{12}^{\text{LO}} - 2\tilde{K}_{44}^{\text{LO}}) \epsilon_{\parallel} + \frac{1}{6} (\tilde{K}_{11}^{\text{LO}} + 2\tilde{K}_{12}^{\text{LO}} + 4\tilde{K}_{44}^{\text{LO}}) \epsilon_{\perp} - \frac{E_{\pm}^{\text{LO}}}{\sqrt{3}} \tilde{F}^{\text{LO}} \right] \text{ (A)}$$

$$\text{όπου } \epsilon_{\perp} = \epsilon'_3 = -\frac{2(C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44})}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \epsilon_{\parallel} \text{ και } E_{\pm}^{\text{LO}} = -\frac{6\sqrt{3}B_e}{\epsilon_0 k_s} \frac{1}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \epsilon_{\parallel}$$

E_{\pm}^{LO} : επανόμενο πιεζοηλεκτρικό πεδίο λόγω παραμόρφωσης, B: μέτρο ελαστικότητας όγκου (bulk modulus), ϵ : πιεζοηλεκτρική σταθερά, ϵ_0 : ηλεκτρική επιδεκτικότητα του κενού, k_s : στατική διηλεκτρική σταθερά του υλικού

ΣΥΜΠΛΗΡΗ ΔΕΙΓΜΑΤΑ:

Μονοαξονική πίεση (σ) παράλληλα στη διεύθυνση [110]:

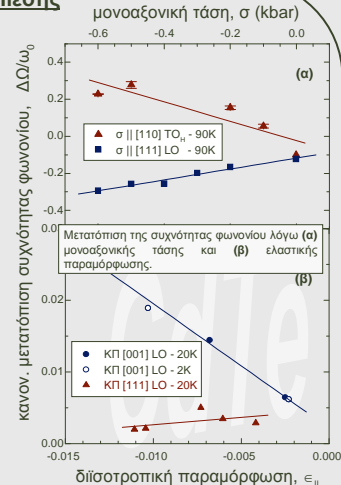
$$\Delta\Omega_{\pm}^{\text{LO}} = \frac{\omega_0 \sigma}{2} \left[S_{12} \tilde{K}_{11}^{\text{LO}} + (S_{11} + S_{12}) \tilde{K}_{12}^{\text{LO}} \right]$$

Μονοαξονική πίεση (σ) παράλληλα στη διεύθυνση [111]:

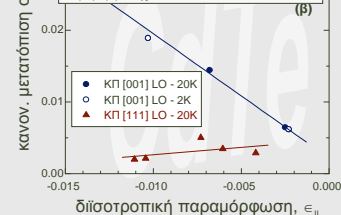
$$\Delta\Omega_{\pm}^{\text{LO}} = \frac{\omega_0 \sigma}{2} \left[(S_{11} + S_{12}) \tilde{K}_{11}^{\text{LO}} + 2(S_{11} + S_{12}) \tilde{K}_{12}^{\text{LO}} - S_{44} \tilde{K}_{44}^{\text{LO}} \right]$$

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Πειραματικός προσδιορισμός των $\Delta\Omega_{\pm}^{\text{LO}}$ σε συνδυασμό με γνωστές τιμές για τις παραμέτρους Grüneisen (γ) $2\tilde{K}_{12}^{\text{LO}} + \tilde{K}_{11}^{\text{LO}} = -6\gamma_{\text{TO,LO}}$ οδηγεί στα κανονικοποιημένα ως προς ω_0^{LO} Φωνονιακά Δυναμικά Παραμόρφωσης (K, F) του CdTe

	\tilde{K}_{11}	\tilde{K}_{12}	\tilde{K}_{44}	\tilde{F} ($\times 10^{-9} \text{ m/V}$)
LO	-1.08 ± 0.11	-2.49 ± 0.06	-4.26 ± 0.14	-1.50 ± 0.11
TO	-1.64 ± 0.72	-4.01 ± 0.35		

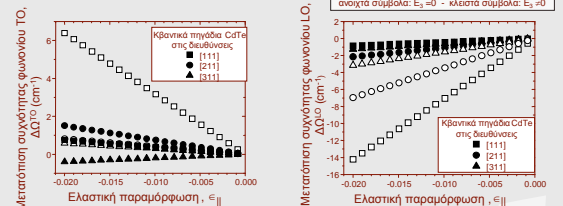


Μετατόπιση της συχνότητας φωνονίου λόγω (α) μονοαξονικής τάσης και (β) ελαστικής παραμόρφωσης.



Επίδραση του Πιεζοηλεκτρικού Πεδίου

Στην περίπτωση των νανοδομών χαμηλής συμμετρίας (π.χ. [111]) τα από κατασκευής παραμορφωμένα κβαντικά πηγάδια εμφανίζουν και ηλεκτρικό πεδίο (E_z) στη διεύθυνση κατόπησης (ϵ_{\parallel}), το οποίο επηρεάζει επιπρόσθετα τις συχνότητες ταλάντωσης του πλέγματος.



$$\tilde{K}_{11}^{\text{LO}} = -1.08 \pm 0.11 \quad \text{(A)} \quad \rightarrow \quad \frac{\Delta\omega_{\text{LO}}(\epsilon_{\parallel})}{\omega_0 \epsilon_{\parallel}} = 4.15$$

$$\tilde{K}_{12}^{\text{LO}} = -2.49 \pm 0.06 \quad \text{(A)} \quad \rightarrow \quad \frac{\Delta\omega_{\text{LO}}(\epsilon'_{\perp})}{\omega_0 \epsilon'_{\perp}} = -3.97$$

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Για ελαστικές παραμορφώσεις της τάξης του 1% σε κβαντικά πηγάδια αναπτυγμένα στη διεύθυνση [111], η συνεισφορά του πιεζοηλεκτρικού πεδίου στη μεταβολή συχνότητας του LO φωνονίου είναι της ίδιας τάξης μεγέθους και αντίθετο πρόσημο με αυτή της παραμόρφωσης του πλέγματος.

Δημοσιεύσεις

1. Piezoelectric effect on the optical phonon modes of strained cubic semiconductors: Case of CdTe quantum wells, V. C. Stergiou, N. T. Pelekanos and Y. S. Raptis, Phys. Rev. B, **67**, 165304-(1-15), (2003).
2. Anharmonic Effects and Faust-Henry coefficient of CdTe, studied in the vicinity of the Energy Gap, V. C. Stergiou and Y. S. Raptis, (to be submitted).

Χρηματοδότηση νέων ερευνητών

Βασιλική Χ. Στεργίου, Μεταπτυχιακή Σπουδαστρια, (Διδάκτωρ, από Ιούλιο 2003)

Ευχαριστίες

Το έργο αποτελεί μέρος του Ερευνητικού Προγράμματος «Φασματοσκοπική Μελέτη Συμπαγών και Στρωματικών Ημιαγωγών Υλικών των Ομάδων II-VI και III-V» (65/119900) που χρηματοδοτήθηκε από το ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΥΠΟΣΤΗΡΙΞΗΣ ΒΑΣΙΚΗΣ ΕΡΕΥΝΑΣ «ΘΑΛΗΣ», του Ειδικού Λογαριασμού του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.