УДК 535.34:548.0 **DOI: https://doi.org/10.30837/IYF.ASCTREDB.2024.122**

ВИКОРИСТАННЯ ЕКСИТОННИХ СПЕКТРІВ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ НАПІВПРОВІДНИКА

Ткаченко А. М.
Науковий керівник – к.фіз.-мат.н., доц. Коваленко О. М.
Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. Фізики, м. Харків, Україна
e-mail: anastasiia.tkachenko3@nure.ua

In this work, we study the effect of excitons on the absorption spectra of solids. The study of exciton absorption spectra makes it possible to investigate the optical and structural properties of solids by a non-destructive method. The spectrum of the semiconductor $Cs_3Cu_2I_5$ is studied in this work. Several exciton bands are observed in the absorption spectrum. The study of the spectral series of exciton bands allowed us to determine the width of the band gap of the compound, the exciton binding energy and its radius.

Спектр поглинання є важливим інструментом для дослідження та аналізу фізичних властивостей матеріалів і знаходить широке застосування у наукових дослідженнях, промисловості, медицині та інших галузях.

Спектри поглинання напівпровідників і діелектриків виявляють дві характерні області: область відносної прозорості, де коефіцієнт поглинання невеликий, і область надзвичайно сильного поглинання (коефіцієнт поглинання дорівнює 105-106 $см^{-1}$). Область сильного поглинання має край, який у ряду напівпровідників обривається дуже різко. Край поглинання характеризує мінімальну енергію, необхідну для переходу електрона з верхнього краю валентної зони на нижні рівні забороненої зони (рис. 1).

Цікавість представляє порівняно вузька енергетична область поглинання, що безпосередньо примикає до краю власного поглинання, так зване екситонне поглинання. Екситоном називають стан, в якому знаходяться електрон та пов'язана з ним дірка. Вони можуть залишатися локалізованими біля свого атома (екситони Френкеля) або це можуть бути стан електрон зони провідності та дірка валентної зони (екситон Ваньє-Мотта). У напівпровідниках зазвичай реалізується друга модель.

Рис. 1. Зонна схема напівпровідника

Утворення стійкої системи електрона та дірки можливе лише за досить низьких температур. У тих випадках, коли енергія зв'язку ексітону стає порівнянною з енергією теплових коливань решітки, екситон руйнується і лінії в спектрі поглинання зникають.

Для того, щоб дослідити екситонний спектр був обраний зразок

сполуки $Cs_3Cu_2I_5$ у вигляді тонкої плівки. Спектри поглинання плівки вимірювалися у широкому інтервалі довжин хвиль (0,2-1,2 мкм) при азотній та кімнатній температурах.

При T=90 К (температура рідкого азоту) у спектрі досліджуваної речовини спостерігалось декілька полос поглинання (рис.2). Їх положення наведені в таблиці 1. При підвищенні температури до T=290 К (кімнатна температура) усі смуги поглинання, крім C-смуг, зсуваються в область низьких частот, поширюються та послаблюються, що вказує на їх екситонне походження. На це ж вказує їх порівняльна вузькість. C-смуги широкі, не відчувають помітного зсуву та розширення зі зростанням температури, що свідчить про їх зв'язок із міжзонними переходами.

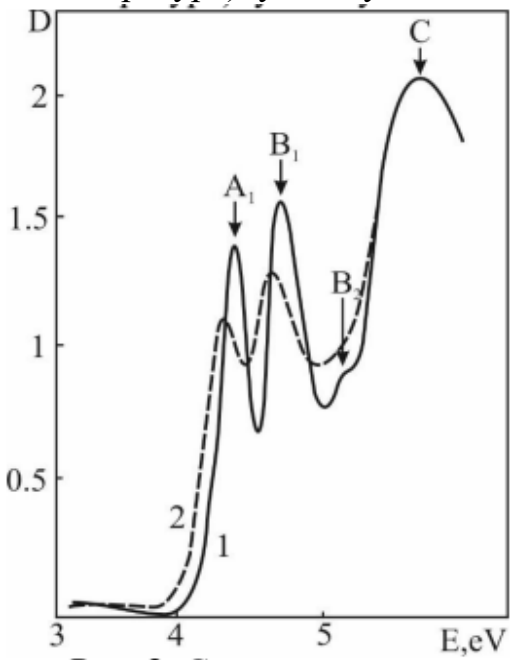

Рис. 2. Спектр поглинання тонких плівок $Cs_3Cu_2I_5$; 1-90 К, 2-293 К.

A_1- та B_1 -смуги в $Cs_3Cu_2I_5$, виходячи з їх інтенсивності, відповідають збудженню екситонів в основний стан (1s-смуги) і примикають до краю прямих дозволених міжзонних переходів. B_2-смуга пов'язана з збудженням екситонів з стану з головним квантовим числом n=2 (2s-смуги). Вважаючи, що B_1 та B_2-смуги створюють екситонну серію, головною лінією якої є B_1-смуга, оцінимо енергію зв'язку екситонів: $R_{ex} = 4/3\left(E_{B1} - E_{B2}\right)$.

Припускаючи, що найбільш довгохвильовій A_1-смузі відповідає екситон з тією ж енергією зв'язку, можна знайти ширину забороненої зони сполук $E_g = E_{A1} + R_{ex}$. В рамках моделі екситонів Ваньє-Мотта можна також оцінити також радіус ексітону в основному стані: $a_{ex} = \left(a_B R\right)/\left(R_{ex} e\right)$. Результати розрахунку наведено в табл. 1

Таблиця 1.

Сполука	E_{A1},еВ	E_{B1},еВ	E_{B2},еВ	E_C,еВ	E_g,еВ	R_{ex},еВ	a_{ex},Å
$Cs_3Cu_2I_5$	4,45	4,80	5,23	5,82	5,02	0,57	2,8

Список використаних джерел:

1. Ruta F.L., Zhang S., Shao, Y. Hyperbolic exciton polaritons in a van der Waals magnet// Nature Communications. 2023. Vol 14, 8261.

2. Kovalenko E.N., Yunakova O.N., Yunakov N. N. Exciton absorption spectrum of thin films of ternary compounds in the CsCl–CuCl system //Low Temperature Physics. 2023, Vol. 49, No. 10, P. 1308–1313.