

УДК 537.312:538.9:621.315.592
PACS 72.40.+w

Коливні процеси в міжзонних електронних переходах у шаруватих кристалах InSe

О. Флюнт

*Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

Чисельно обчислено імпульсну характеристику електронної складової відносної діелектричної проникності шаруватого кристала n-InSe зі спектра модульованої за інтенсивністю світлового потоку фотопровідності. Обчислення проведені методом інтерполяції спектра кубічними сплайнами з використанням бібліотеки високоточних обчислень MPFR. Отримана імпульсна характеристика описує процес встановлення діелектричної поляризації кристала в часовому просторі в діапазоні малих часів $10^{-15} - 10^{-13}$ с та має вигляд коливного процесу з загасанням. Частота коливань відповідає ширині енергії забороненої зони кристала InSe (1,22 eV) з часом загасання $7 \cdot 10^{-14}$ с. Проте, перше повне коливання проходить з дещо вищою частотою, що зумовлено впливом іншої інтенсивної смуги поглинання кристала з енергією активації $\sim 1,43$ eV.

Ключові слова: імпульсна характеристика, відгук в часовому просторі, модульована фотопровідність, інтегральне перетворення Фур'є, діелектрична поляризація

1 Вступ

Відносна діелектрична проникність твердих тіл характеризує їхню здатність поляризуватися у зовнішньому електричному полі. Для реакції твердого тіла на зміну зовнішнього електричного поля потрібен певний час. Тому для опису перехідного процесу в часовому просторі використовують імпульсну $h(t)$ або перехідну $f(t)$ характеристики, які є реакцією зміни поляризації з часом на зміну електричного поля у вигляді дельта-функції або прямокутної сходинки, відповідно. У частотному просторі використовують частотний спектр, амплітуда синфазної $\chi_1(\omega)$ і зміщеної по фазі на 90° $\chi_2(\omega)$ складових якого є реакцією поляризації на змінне з часом відповідно до синусоїдального закону з циклічною частотою ω електричне поле [1,2]. Як імпульсна характеристика, так і частотний спектр описують кінетику того самого

процесу і тому не є незалежними. В лінійних системах вони пов'язані між собою через пряме і зворотне інтегральні перетворення Фур'є:

$$h(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_1(\omega) \cos(\omega t) d\omega = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_2(\omega) \sin(\omega t) d\omega \quad (1)$$

$$\chi_1(\omega) = \int_0^{\infty} h(t) \cos(\omega t) dt, \quad \chi_2(\omega) = \int_0^{\infty} h(t) \sin(\omega t) dt \quad (2)$$

Перехідну (імпульсну) характеристику модульованих спектрів фотопровідності можна обчислювати як за частотою модуляції інтенсивності світлового потоку, так і за частотою електромагнітної хвилі. У першому разі отримуємо реальну часову залежність релаксації струму фотопровідності, яку, в принципі, можна спостерігати експериментально, записуючи зміну струму фотопровідності зі зміною часу після раптового припинення освітлення кристала. Проте спектр модульованої фотопровідності також залежить від довжини хвилі електромагнітного випромінювання. Перетворення Фур'є від частоти електромагнітного випромінювання може дати імпульсну характеристику в часовому просторі кінетики діелектричної поляризації, а тому і електронної складової діелектричної проникності, зумовленої тими електронними переходами, які приводять до фотопровідності.

Селенід індію – шаруватий напівпровідник з шириною забороненої зони приблизно 1,2 еВ за кімнатної температури, перспективний для виготовлення напівпровідникових фотоелектричних приладів [3–5]. Дослідження кінетики відгуку електронної підсистеми кристалів InSe на зміну зовнішнього електричного поля важливі як для дослідження поведінки високочастотної складової відносної діелектричної проникності зі зміною часу, так і для вивчення особливостей електронного зонного енергетичного спектра кристала.

2 Методика проведення обчислень інтегральних перетворень Фур'є та його перевірка на моделі лінійного гармонічного осцилятора

Спектри синфазної $\chi_1(\omega)$ та зміщеної по фазі на $\pi/2$ $\chi_2(\omega)$ складових гармонічного відгуку лінійного гармонічного осцилятора з загасанням підлягають формулі

$$\chi_1(\omega) - j\chi_2(\omega) = \frac{\chi_0\omega_0^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} - j \frac{\chi_0\omega_0^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (3)$$

де j – уявна одиниця, ω_0 – циклічна частота власних коливань, γ – коефіцієнт загасання.

На рис. 1а показано спектр лінійного гармонічного осцилятора з $\omega_0/(2\pi) = 10^{14}$ Гц і $\gamma = 10^{14}$ с⁻¹. На частоті власних коливань на частотній залежності уявної

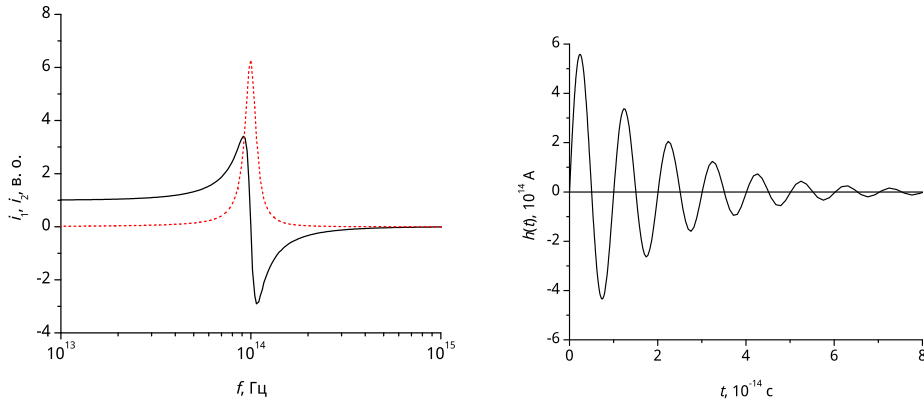


Рис. 1: Спектр дійсної χ_1 та уявної χ_2 частин лінійного резонансного процесу з $\nu_0 = 10^{14}$ Гц і $\gamma = 10^{14}$ с (а) та імпульсна характеристика в часовому просторі, обчислена чисельно за допомогою інтегрального косинус перетворення Фур'є зі спектра уявної частини резонансного відгуку (б)

частини спектра спостерігаємо гострий максимум, ширина якого залежить від коефіцієнта загасання γ . Синфазна частина комплексного відгуку на частоті близькій до ω_0 зазнає різкого коливання, яке близьке до розриву за малих значень γ .

Для обчислення імпульсних характеристик резонансних спектрів використаємо метод інтерполяції спектрів кубічними сплайнами, який дозволяє проводити обчислення для спектрів відстані між точками якого неоднакові за величинами [6–8]. Метод реалізовано за допомогою бібліотеки високоточних обчислень MPFR [9], оскільки в процесі проведення обчислень доводиться обчислювати суми доданків, які відрізняються між собою на багато порядків за величиною.

Перед проведенням обчислень методом інтерполяції спектрів кубічними сплайнами, проведемо перевірку придатності цього методу для обчислення інтегральних перетворень Фур'є резонансних спектрів на моделі лінійного гармонічного осцилятора. Спектр уявної складової відгуку, який відповідає моделі лінійного гармонічного осцилятора з загасанням, має вигляд симетричного максимуму на залежності від частоти електромагнітної хвилі. Імпульсну характеристику для моделі лінійного гармонічного осцилятора можна отримати аналітично у вигляді:

$$h(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_2(\omega) \sin(\omega t) d\omega = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi_0 \omega_0^2 \gamma \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \sin(\omega t) d\omega \sim$$

$$\sim A \exp\left(-\frac{\gamma}{2} t\right) \sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}} t + \varphi\right) \quad (4)$$

де A, φ – константи. Вона має вигляд загасаючих гармонічних коливань з частотою трохи меншою ніж ω_0 .

Чисельно обчислена імпульсна характеристика цього спектра за допомогою інтегрального синус перетворення Фур'є спектра уявної частини відгуку показана на рис. 1б. Звідси видно, що інтерполяція кубічними сплайнами може бути використана для обчислення інтегральних перетворень Фур'є резонансних спектрів.

3 Спектр модульованої фотопровідності шаруватого кристала n-InSe та його імпульсна характеристика у часовому просторі

Переважно спектри фотопровідності напівпровідників мають форму асиметричного резонансного процесу з гострим максимумом та довгохвильовим краєм, які відповідає інтенсивній смузі поглинання між стелею валентної зони і дном зони провідності. На рис. 2а показано спектр модульованої фотопровідності шаруватого кристала GaSe на довжинах хвиль від 400 до 100 нм. Вимірювання спектрів модульованої фотопровідності проводили за допомогою спектрофотометра СФ-4А. Модуляцію інтенсивності світлового потоку здійснювали за допомогою механічного обертання металевого диска з прорізами. Для вимірювання синфазної синусоїдальної складової струму фотопровідності використовували синхронний підсилювач УПІ-1, на вхід опорного сигналу якого подавали електричний періодичний сигнал з пари світлодіод-фотодіод промінь світла якої періодично перекривав модуляційний диск.

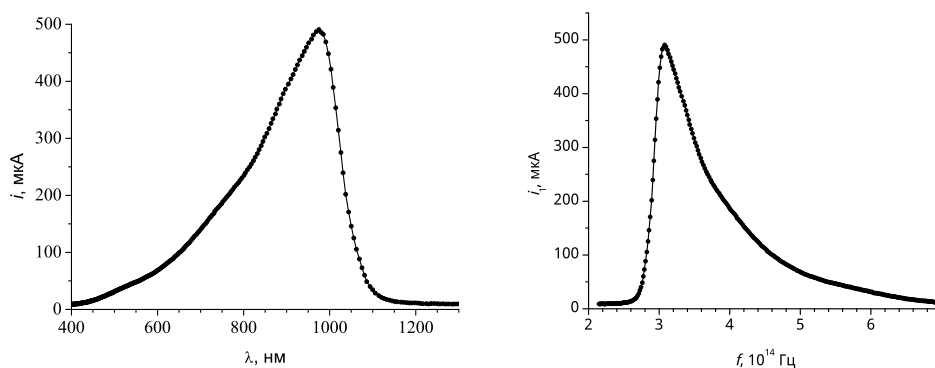


Рис. 2: Спектр модульованої за інтенсивністю світлового потоку фотопровідності шаруватого кристала InSe від довжини (а) та частоти (б) хвилі електромагнітного випромінювання на частоті модуляції інтенсивності світлового потоку 500 Гц

Спектр фотопровідності від частоти хвилі електромагнітного випромінювання (рис. 2б) можна розглядати як резонансний процес (3) з усередненою добротністю рівною $Q = \omega_0/\Delta\omega = 7,5$, де $\Delta\omega$ – півширина спектра на висоті 1/2 від значення у максимумі. Асиметрія спектра фотопровідності від енергії кванта світла або частоти електромагнітного випромінювання вказує на те, що спектр включає в себе декілька інтенсивних елементарних смуг поглинання. Спектр дійсної частини фотопровідно-

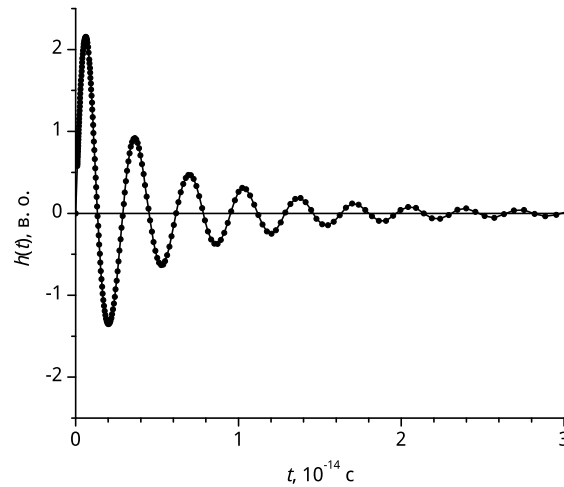


Рис. 3: Імпульсна характеристика за частотою електромагнітного випромінювання отримана зі спектра модульованої фотопровідності шаруватого кристала InSe за допомогою інтегрального синус перетворення Фур'є

сті $i_1(\omega)$ пропорційний до оптичного коефіцієнта поглинання, який пропорційний до уявної частини оптичної діелектричної проникності. Тому для обчислення імпульсної характеристики будемо використовувати інтегральне синус перетворення Фур'є (1).

Імпульсна характеристика в часовому просторі обчислена за допомогою синус перетворення спектра синфазної складової фотопровідності кристала InSe показана на рис. 3. Вона має вигляд осциляційного процесу з загасанням амплітуди коливань. Проте імпульсну характеристику кристала InSe не можна апроксимувати за допомогою однієї синусоїди з загасанням тому, що фаза наступних після першого повного коливання сильно змінюється та наближається до функції косинуса. До того ж перша осциляція відрізняється трохи вищою частотою та меншим часом релаксації (більшим коефіцієнтом загасання). Це відповідає інтенсивній смугі поглинання з енергією кванта порядку 1,43 eV. Наступні коливання з частотою осциляцій $3 \cdot 10^{14}$ Гц (1,22 eV) відповідають енергії ширини забороненої зони кристала. Загасання амплітуди осциляцій дозволяє визначити добротність осциляційного процесу $Q = \omega_0/\gamma = 6,6$ та коефіцієнт загасання $\gamma/2 = 1,4 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$. Оскільки діелектричний спектр кристала в досліджуваному діапазоні енергій та довжин хвиль зумовлений електронними переходами, то особливості імпульсної характеристики зумовлені особливостями електронного зонного енергетичного спектра кристалів InSe.

Висновки

Чисельне обчислення інтегрального синус перетворення Фур'є модульованих за інтенсивністю світлового потоку спектрів фотопровідності дозволяють отримати ім-

пульсну характеристику в часовому просторі електронної діелектричної поляризації кристалів. Імпульсна характеристика описує залежність від часу реакції електронної складової поляризації кристала внаслідок дії імпульсу зовнішнього електричного поля у вигляді дельта-функції зумовлених тими інтенсивними смугами оптичного поглинання, які приводять до фотопровідності. Отримана імпульсна характеристика шаруватого кристала n-InSe має вигляд осциляційного процесу з загасанням. Частота коливань відповідає енергії ширини забороненої зони 1,22 eV; коефіцієнт загасання $\gamma/2 = 1,4 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ (час релаксації $\tau = 7 \cdot 10^{-14} \text{ c}$). Проте, імпульсну характеристику не можна апроксимувати за допомогою синусоїди з загасанням з одним значенням періоду. Перше повне коливання має дещо вищу частоту, що зумовлено впливом на кінетику електронної складової діелектричної релаксації іншої інтенсивної смуги поглинання кристала n-InSe з енергією активації $\sim 1,43 \text{ eV}$.

Список використаної літератури

1. Jonscher A. K. Dielectric Relaxation in Solids/ A. K. Jonscher // Journal of Phys. D: Appl. Phys. – 1999. – Vol. 32. – P. R57–R70.
2. Dissado L. A. Dielectric Relaxation in Solids/ L. A. Dissado // Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials. – Springer(New York): 2006. – P. 187–212.
3. Hasan T. Optical and electrical properties of indium selenide / T Hasan , N Kumar , B L Scharma , A V R Warier // Indian J. Pure and Appl. Physics. – 1978. – Vol. 16, N 5. – P. 575–577.
4. Gurbulak B. Growth and Temperature Dependence of Optical Properties of Er Doped and Undoped n-Type InSe / B. Gurbulak , M. Yildirim , A. Ates [et al] // Japanese Journal of Applied Physics – 1999. – N9R, Vol. 38. – P. 5133–5136.
5. Segura A. Strong optical nonlinearities in gallium and indium selenides related to inter-valence-band transitions induced by light pulses // A. Segura, J. Bouvier , A. M. V. ndrés [et al] /Phys. Rev. B. – 1997. – Vol.56, N7.–P.4075–4084.
6. Флюнт О. Є. Розрахунок перехідної характеристики низькоомних шаруватих кристалів GaSe / О. Є. Флюнт // Вісник Львів. ун-ту. Серія фізична – 2009. – Вип. 44. – С. 226–233.
7. Флюнт О. Є. Перехідна характеристика високоомних шаруватих кристалів GaSe, зумовлена струмами поляризації / О. Флюнт // Теор. електротехніка. – 2010. – Вип. 61. – С. 69–75.
8. Флюнт О. Є. Вплив розрядності чисел на правильність та точність чисельного розрахунку перехідних діелектричних характеристик / О. Є. Флюнт // Вісник Львів. ун-ту. Серія фізична – 2013. – Вип. 48. – С. 270–278.
9. The Multiple Precision Floating-Point Reliable Library / The MPFR team // <http://www.mpfr.org/mpfr-current/mpfr.pdf>. – 2013. – 56 p.

Стаття надійшла до редакції 22.04.2016

прийнята до друку 17.06.2016

Oscillating processes in interband electronic transitions in InSe layered crystals

O. Flunt

*Ivan Franko National University of Lviv
Dragomanov St., 50, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

Impulse response of electronic term of relative dielectric permittivity of layered crystal n-InSe spectrum of light beam intensity modulated photoconductivity has been numerically calculated. The calculations are performed by the spectrum interpolation using cubic splines and applying high-precision computation library MPFR. The resulting impulse response describes the process of installing of crystal dielectric polarization in the time-domain within small values of $10^{-15} - 10^{-13}$ s range and looks like oscillating relaxation process. The oscillation frequency corresponds to the width of the energy band gap of InSe crystals (1.22 eV) with relaxation time $7 \cdot 10^{-14}$ s, but the first full oscillation characterized by slightly higher frequency is caused by the effect of another intense absorption band with activation energy of 1.43 eV.

Key words: pulse characteristic, time-domain response, modulated photoconductivity, integral Fourier transform, dielectric polarization

Колебательные процессы в межзонных электронных переходах в слоистых кристаллах InSe**О. Флюнт**

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко
ул. Драгоманова 50, 79005 Львов, Украина
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

Численно вычислено импульсную характеристику электронной составляющей относительной диэлектрической проницаемости слоистого кристалла n-InSe из спектра модулированной по интенсивности светового потока фотопроводимости. Вычисления проведены методом интерполяции спектра кубическими сплайнами с использованием библиотеки высокоточных вычислений MPFR. Полученная импульсная характеристика описывает процесс установления диэлектрической поляризации кристалла во временном пространстве в диапазоне малых времен $10^{-15} - 10^{-13}$ с и имеет вид колеблющегося процесса с затуханием. Частота колебаний соответствует ширине энергии запрещенной зоны кристалла InSe (1,22 эВ) с временем затухания $7 \cdot 10^{-14}$ с, однако, первое полное колебание имеет несколько более высокую частоту, что обусловлено влиянием другой интенсивной полосы поглощения кристалла с энергией активации 1,43 эВ.

Ключевые слова: импульсная характеристика, отклик во временном пространстве, модулированная фотопроводимость, интегральное преобразование Фурье, диэлектрическая поляризация