

УДК 538.214

Вплив внутрішніх локальних деформацій на оптичні характеристики $Ga_xIn_{1-x}P$.

Виклюк Я.І., Дейбук В.Г.

Чернівецький національний університет ім.Ю.Федьковича,
вул.Коцюбинського, 2, м.Чернівці, 58012, Україна

E-mail: vyklyuk@mail.Ru, vdei@chdu.cv.ua

Вступ

Останнім часом сплави $Ga_xIn_{1-x}P$ викликають підвищений інтерес у зв'язку з їхнім використанням у світловипромінюючих діодах, напівпровідникових інжекційних лазерах, біполярних транзисторах на гетеропереходах і транзисторах з високою електронною рухливістю, які показують кращі характеристики в порівнянні з GaAs [1, 2].

Базисні характеристики і фізичні параметри $Ga_xIn_{1-x}P$, однак, ще не достатньо вивчені, що обумовлено складностями в отриманні високоякісних кристалів, оскільки неузгодженність постійних ґраток Ga(5.424 Å) і In(5.869 Å) складає 7.6% і є найбільшої серед сполук A^3B^5 .

Потрійні напівпровідникові сплави A^3B^5 зі структурою цинкової обманки, як правило, кристалізуються як неупорядковані сплави, у яких одна з двох ґранецентрованих кубічних підґраток (аніонна або катіонна) є хімічно неупорядкована. Експериментальні дослідження кристалічної структури потрійних твердих розчинів A^3B^5 методом розтягнутої тонкої структури рентгенівського поглинання (EXAFS) дозволили визначити характерні риси цих матеріалів [3]. По-перше, підґратка, що містить атоми двох типів

структурно близька до віртуального кристалу і задовольняє закону Вегарда. По-друге, інша підгратка сильно перекручена, так, що відстані до найближчих сусідніх атомів лише слабо залежать від складу розчину. Виникаючі при цьому локальні внутрішні напруги можуть стати причиною фазових перетворень, а саме, розпаду і, з іншого боку, формування суперструктур [4]. Крім цього, добре відомо, що деформації часто призводять до оптичної активності в напівпровідниках [5]. Оптичні методи дослідження дозволяють детально вивчити виникаючі внутрішні деформації і напруги. Тому метою даної роботи є теоретичне дослідження впливу внутрішніх локальних деформацій на оптичні характеристики напівпровідникових твердих розчинів заміщення $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$. Для розрахунку електронної зонної структури був застосований метод локального модельного псевдопотенціалу, що включає деформаційно-залежну поправку [6]. Це дозволило розрахувати дійсну і уявну частини діелектричної функції, на основі яких були отримані оптичні характеристики зазначених сплавів. Проаналізовано вплив внутрішніх локальних деформацій на електронну зонну структуру в наближенні віртуального кристалу (VCA), а також на коефіцієнт заломлення $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$.

Електронна зонна структура.

Традиційні емпіричні псевдопотенціали $v(q)$, задані лише для дискретних значень хвильового вектора, не дозволяють коректно відобразити експериментально виміряні ефективні маси, деформаційні потенціали та інші електронні властивості різноманітних напівпровідникових структур. Тому в даній роботі ми скористалися методом локального модельного псевдопотенціалу, що у базисі плоских хвиль приводить до секулярної задачі [8]:

$$\det \left(\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E(\mathbf{k}) \right) \delta_{G,G'} \delta_{s,s'} + V_{ps}(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|) \delta_{s,s'} + V_{SO}^{ss'}(\mathbf{G}, \mathbf{G}') \right) = 0, \quad (1)$$

де \mathbf{G}, \mathbf{G}' – вектори оберненої ґратки. Перший член відповідає кінетичній енергії, другий – локальному модельному псевдопотенціалу $V_{ps}(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|)$, третій – спін-орбітальній взаємодії:

$$V_{SO}^{ss'}(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = (\mathbf{G} \times \mathbf{G}') \sigma_{s,s'} \left\{ -\lambda^S \cos(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \boldsymbol{\tau} + \lambda^A \sin(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \boldsymbol{\tau} \right\}, \quad (2)$$

де S та S' – спінові стани, $\boldsymbol{\tau} = (a/8)[1, 1, 1]$, a – постійна ґратки, σ – матриці Паулі, λ^S , λ^A – підґоночні параметри спін-орбітальної взаємодії.

Врахуємо локальні деформації, що виникають у сплавах, доповнивши псевдопотенціал окремого атому $v_\alpha(G)$ фактором $(1 + \delta v_\alpha(\varepsilon))$ [6], тоді

$$V_{ps}(\mathbf{G}, \varepsilon) = \frac{1}{\Omega_{cell}} \sum_{\alpha, n} \{v_\alpha(|\mathbf{G}|) (1 + \delta v_\alpha(\varepsilon))\} \cdot \exp(i\mathbf{G}\mathbf{R}_{\alpha, n}), \quad (3)$$

де ε – відносна локальна деформація, Ω_{cell} – об'єм елементарної комірки, $\mathbf{R}_{\alpha, n}$ – положення n -го атому сорту α .

У лінійному по деформації наближенні:

$$\delta v_\alpha(\varepsilon) = \sum_{ij} a_{ij} \varepsilon_{ij}. \quad (4)$$

Для структури цинкової обманки виконуються умови:

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz} \quad (5)$$

$$a_{ij} = 0 \text{ при } i \neq j.$$

Тоді (4) прийме вигляд:

$$\delta v_{\alpha}(\varepsilon) \propto Tr(\varepsilon). \quad (6)$$

Вибір функціональної форми екранованого псевдопотенціалу диктується умовою достатньої його гнучкості при описі можливо більшої кількості фізичних характеристик. При цьому кількість параметрів псевдопотенціалу повинна знаходитися в розумних межах, а самі параметри не повинні значно змінюватися при оптимізації електронної структури. Виберемо псевдопотенціал у формі [7]:

$$v_{\alpha}(\mathbf{G}) = a_{0\alpha} \frac{(\mathbf{G}^2 - a_{1\alpha})}{a_{2\alpha} \exp(a_{3\alpha} \mathbf{G}^2) - 1}, \quad (7)$$

причому

$$\delta v_{\alpha}(\varepsilon) = a_{4\alpha} Tr(\varepsilon). \quad (8)$$

Тензор відносної локальної деформації ε_{ij} розраховується як відносна зміна об'єму елементарної комірки.

На рис.1 показані модельні псевдопотенціали окремих атомів в оберненому просторі InP і GaP, а в табл.1 приведені значення псевдопотенціальних параметрів a_0, a_1, a_2, a_3, a_4 , а також λ^S, λ^A . Процедура знаходження псевдопотенціалів зводилася до підгонки рівноважної зонної структури для бінарних напівпровідників InP і GaP. Після цього коефіцієнти a_4 катіонів вибиралися так, щоб узгодити розраховані значення

гідростатичних деформаційних потенціалів з експериментальними. У табл.2 приведені розраховані нами енергетичні міжзонні віддалі InP і GaP у деяких високосиметричних точках зони Бріллюена в порівнянні з отриманими методом нелокального псевдопотенціалу [8] і експериментальними значеннями. Розраховані ефективні маси електронів дна зони провідності і важких дірок задовільно узгоджуються з експериментальними даними.

Гідростатичний деформаційний потенціал забороненої зони в точці Γ визначається як:

$$a_g = V \frac{\partial E_{gap}}{\partial V}. \quad (9)$$

Деформаційний потенціал максимуму валентної зони a_v знаходиться аналогічно, тоді деформаційний потенціал мінімуму зони провідності $a_c = a_g + a_v$. Наші розрахунки дають досить гарний збіг деформаційних потенціалів з експериментальними [9] як по величині, так і по знаку.

Вплив температури на зонну структуру твердих розчинів $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ враховувався за допомогою методики Брукса-Ю[8]. При скінченній температурі T кожна фур'є-компонента α -го псевдопотенціалу коректується за допомогою фактора Дебая-Уоллера $M_\alpha(G, T)$, тоді електронні енергії

$$E(\mathbf{k}, T) = E(\mathbf{k}, \{V_\alpha(G) e^{-M_\alpha(G, T)}\}). \quad (10)$$

Для кубічних кристалів []

$$M_\alpha(G, T) = \frac{\hbar^2}{2m_\alpha k_B} \cdot G^2 \left(\frac{T}{\theta_\alpha^2} \right) \left[\Phi \left(\frac{\theta_\alpha}{T} \right) + \frac{1}{4} \frac{\theta_\alpha}{T} \right], \quad (11)$$

де m_α – маси іонів, Θ_α – температури Дебая, Φ – інтеграл Дебая першого роду. У наших розрахунках були прийняті температури Дебая: $\Theta_{Ga} = 125$ К, $\Theta_{In} = 82$ К, $\Theta_P = 150$ К [10].

Відповідно до закону Вегарда і наближення віртуального кристалу (VCA) у твердому розчині $Ga_xIn_{1-x}P$ постійна ґратки і псевдопотенціали визначаються як лінійні комбінації відповідних величин для InP і GaP:

$$\begin{aligned} a_{ss} &= a_{GaP}x + a_{InP}(1-x) \\ V_{ss} &= V_{GaP}x + V_{InP}(1-x) \end{aligned} \quad (12)$$

де a_{ss} і V_{ss} – постійна ґратки і псевдопотенціальний форм-фактор твердого розчину заміщення.

Слабка відмінність псевдопотенціалу аніона (P) у сполуках InP і GaP (рис.1) підтверджує експериментальний факт слабкої залежності параметра аніонної підґратки від складу потрійного твердого розчину [3]. На рис.2 показані концентраційні залежності основних енергетичних відстаней. Врахування локальних напруг у сплаві також дозволяє отримати задовільне значення положення точки кросоверу (пряма-непряма заборонена зона) $x_c=0.652$ порівняно з експериментальним $x_c=0.69$ [11,12].

Все вищесказане дозволяє нам перейти до знаходження діелектричної функції та оптичних характеристик, використовуючи розраховану зонну структуру $Ga_xIn_{1-x}P$ при наявності внутрішніх локальних деформацій.

Оптичні характеристики

Електронна зонна структура безпосередньо пов'язана з комплексною діелектричною функцією напівпровідника $\varepsilon(\mathbf{E}) = \varepsilon_1(\mathbf{E}) + i\varepsilon_2(\mathbf{E})$. Знання комплексної діелектричної функції дозволяє відшукати інші оптичні

характеристики, зокрема, показник заломлення середовища (n), коефіцієнт поглинання (α), коефіцієнт відбитвання (R) та інші, пов'язані з ними. Уявна частина діелектричної функції [8]:

$$\varepsilon_2(E) = \frac{4\pi^2 \hbar^2 e^2}{m^2 E^2} \sum_{vc} \int_{ZB} \frac{2 d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \cdot |\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{vc}(\mathbf{k})|^2 \cdot \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - E), \quad (14)$$

де

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{vc}(\mathbf{k}) = \langle \psi_{ck} | \mathbf{e} \mathbf{p} | \psi_{vk} \rangle, \quad (15)$$

\mathbf{e} – вектор поляризації, \mathbf{p} – оператор імпульсу.

Сума проводиться по початкових індексах валентних зон (v) і кінцевих станах зон провідності (c). При сумуванні були враховані вісім верхніх валентних зон і чотири нижні зони провідності. Інтегрування проводилось по першій зоні Бріллюена методом тетраєдрів [19], причому зона Бріллюена була розділена на 3000 рівновеликих тетраєдрів. Матричні елементи (15) розраховувалися на отриманих власних псевдохвильових функціях і контролювалися за допомогою правил відбору. При розрахунку $\varepsilon_2(E)$ екситонні ефекти не враховувалися.

Оскільки GaP є непрямозонною напівпровідниковою сполукою, то при розрахунку $\varepsilon_2(E)$ були враховані непрямі міжзонні переходи, тоді у випадку поглинання фонона $\hbar\omega_q$ [20]:

$$\varepsilon_{2\text{погл.}\phi}(E) = \frac{4\pi^2 \hbar^2 e^2}{m^2 E^2} \int_{ZB} \int_{ZB} \frac{2 d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3 (2\pi)^3} \cdot \left| \frac{\langle \psi_{ck_2} | V_p(\mathbf{q}, \mathbf{r}) | \psi_{\beta k_1} \rangle n_q^{1/2} \langle \psi_{\beta k_1} | \mathbf{e} \mathbf{p} | \psi_{vk_1} \rangle}{E_\beta(\mathbf{k}_1) - E_v(\mathbf{k}_1) - E} \right|^2 \cdot \delta(E_c(\mathbf{k}_2) - E_v(\mathbf{k}_1) - E - \hbar\omega_q) \quad (16)$$

Дійсна частина діелектричної функції $\varepsilon_1(E)$ розраховувалася, використовуючи співвідношення Крамерса-Кроніга. На рис.3,4 результати наших розрахунків $\varepsilon_1(E)$ і $\varepsilon_2(E)$ для InP і GaP, відповідно, співставлені з експериментальними залежностями [21]. Розрахований спектр $\varepsilon_2(E)$ для InP починається з 1.5 еВ, далі слідує спін-орбітально розщеплений пік при 3.2 еВ, що добре збігається з експериментальним значенням (переходи в напрямку $\Lambda_{v4,5} - \Lambda_{c6}$ і $\Lambda_{v6} - \Lambda_{c6}$ ближче до точки L), самий інтенсивний пік при 4.5 еВ дещо зміщений у низькоенергетичну область у порівнянні з експериментальним значенням 4.7 еВ (переходи $\Delta_{v7} - \Delta_{c6}$ і $\Delta_{v6} - \Delta_{c6}$ ближче до точки X), далі йде різкий пік при 6.2 еВ (переходи $\Lambda_{v4,5} - \Lambda_{c7}$ і $\Lambda_{v6} - \Lambda_{c7}$) і слабкий пік при 7.7 еВ (переходи в напрямку Σ).

Крива $\varepsilon_2(E)$ у випадку GaP містить дуже гострий пік найбільшої інтенсивності при 4.6 еВ, зміщений порівняно з експериментальним значення 5 еВ (переходи $\Delta_{v7} - \Delta_{c6}$ і $\Delta_{v6} - \Delta_{c6}$ ближче до точки X), пік при 3.5 еВ також зміщений у низькоенергетичну область у порівнянні з експериментальним значенням 3.5 еВ (переходи в напрямку $\Lambda_{v4,5} - \Lambda_{c6}$ і $\Lambda_{v6} - \Lambda_{c6}$ ближче до точки L), пік при 6.3 еВ (переходи $\Lambda_{v4,5} - \Lambda_{c7}$ і $\Lambda_{v6} - \Lambda_{c7}$) і невеличкий пік при 7.9 еВ (переходи в напрямку Σ). Усі піки мають складну тонку структуру і визначаються не тільки зазначеними переходами, але і переходами в об'ємі зони Бріллюена.

З загальної теорії оптичних межзонних переходів відомо, що спектр $\varepsilon_2(E)$ кількісно визначається коректністю розрахунків дисперсії зон, можливістю електронних переходів і врахуванням усіх точок зони Бриллюена. Це дає нам підставу перейти до обчислення оптичних характеристик. На рис.5 приведені результати розрахунку енергетичної залежності дійсної частини коефіцієнта заломлення $n(E)$ для сплаву

$\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ як з врахуванням, так і без врахування локальних внутрішніх деформацій. Наявність останніх понижує перший і другий характерні максимуми залежності $n(E)$ і зсуває їх у бік більших енергій. Порівняння з відповідною експериментальною залежністю [22] підтверджує необхідність врахування внутрішніх локальних деформацій у теоретичних розрахунках оптичних параметрів твердих розчинів заміщення, що були розглянуті.

Висновки.

Досліджена електронна зонна структура твердих розчинів $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ методом локального модельного псевдопотенціалу при врахуванні неузгодженості постійних ґратки. Виникаючі внаслідок цього локальні деформації ґратки були враховані при розрахунках ефективних мас і деформаційних потенціалів, а також залежності ширини забороненої зони від складу x твердого розчину. Отримані значення точки кросовера x_c задовільно пояснюють відповідні експериментальні залежності.

Врахування внутрішніх локальних деформацій у сплавах $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ дозволяє коректно пояснити їх основні оптичні характеристики, зокрема коефіцієнт заломлення.

Список літератури

- 1 *T. Katsuyama, T. Yoshida, J. Shinkai, J. Hasimoto, and H. Hayashi.* // *Appl. Phys. Lett.* – 1991 – **59**, №26 – p3351 – 3353
- 2 *Y. F. Yang, C. C. Hsu, and E. S. Yang.* // *IEEE Electron Device Lett.* – 1996 – **17** – p363 – 370
- 3 *J. C. Jr. Mikkelsen and J. B. Boys.* // *Phys. Rev. B* – 1983 – **28**, №12 – p7130 – 7140
- 4 *R. Asomoza, V. A. Elyukhin, S. G. Konnikov.* // *Semicond. Sci. Technol* – 1995 – **10** – p1122 – 1125
- 5 *B. Koopmans, P. V. Santos and M. Cardona.* // *Phys. Stat. Sol. (b)* – 1998 – **205**, №2 – p419 – 463
- 6 *T. Matilla, L.-W. Wang, A. Zunger.* // *Phys. Rev B* – 1999 – **59**, №23 – p15270 – 15284
- 7 *M. Schluter, J. R. Chelikowsky, S. G. Louis and M. L. Cohen.* // *Phys. Rev. B* – 1975 – **12**, №10 – p4200 – 4214
- 8 *M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky.* *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors* – Berlin: Springer Verlag, 1988
- 9 *A. Blacha, H. Presting, and M. Cardona.* // *Phys. Stat. Sol. B.* – 1984 – **126**, №1 – p11 – 36
- 10 *A.P.Регель* Периодический закон и физические свойства электронных расплавов –М.: Наука, 1978
- 11 *A. M. Joullie, C. Alibert.* // *J. Appl. Phys.* – 1974 – **45**, №11 – p5472 – 5474
- 12 *A. Chen, A. Sher.* *Semiconductor Alloys: Physics and Material Engineering* – N.Y.: Plenum Press, 1995
- 13 *D. Nelson, L. Johnson, and M. Gershenson.* // *Phys. Rev.* – 1964 – **135**, №5a – A1399 – A1406

- 14 *L. Ley, R. Pollak, R. McFeely, S. Kowalczyk, and D. A. Sherlet.* // *Phys. Rev. B* – 1974 – **9**, №2 – p600 – 621
- 15 *D. Kyser, and V. Rehn* // *Phys. Rev. Lett.* – 1978 – **40**, №15 – p1038 – 1040
- 16 *D. Aspnes, C. Olson, and D. Lynch.* // *Phys. Rev. B* – 1975 – **12**, №4 – p1371 – 1376
- 17 *J. Camassel, P. Merle, L. Bayo, and H. Mathieu.* // *Phys. Rev. B* – 1980 – **22**, №4 – p2020 – 2024
- 18 *E. Matatagui, A. Thompson, and M. Cardona.* // *Phys. Rev.* – 1968 – **176**, №6 – p950 – 960
- 19 *G. Lehmann, M. Taut.* // *Phys. Stat. Sol. B.* 1972 – **54**, №2 – p469 – 477
- 20 *Ф.Бассани, Дж.П.Парравичини.* Электронные состояния и оптические переходы в твёрдом теле. –М.: Наука, 1982
- 21 *D. E. Aspnes, A. A. Studna.* // *Phys. Rev. B.* – 1983 – **27**, №2 – p985 – 1009
- 22 *M. Schubert, V. Gottschalch, C. M. Herzinger, H. Yao, P. G. Snyder, J. A. Woollam.* // *J. Appl. Phys.* – 1995 – **77**, №7 – p3416 – 3419
- 23 *S. -G. Shen, and X. -Q. Fan.* // *J. Phys. : Condens. Matter* – 1996 – **8**, №24 – p4369 – 4380
- 24 *M. Helm, W. Knap, W. Seidenbusch, R. Lassig, and E. Gornik.* // *Solid. State. Commun* – 1985 – **53**, №6 – p547 – 550

Вплив внутрішніх локальних деформацій на оптичні характеристики $Ga_xIn_{1-x}P$.

Виклюк Я.И., Дейбук В.Г.

Чернівецький національний університет ім.Ю.Федьковича,
вул.Коцюбинського, 2, м.Чернівці, 58012, Україна, E-mail: vyklyuk@mail.ru

Досліджена електронна зонна структура твердих розчинів $Ga_xIn_{1-x}P$ методом локального модельного псевдопотенціалу при врахуванні неузгодженості постійних ґратки. Виникаюча внаслідок цього локальна деформація ґратки була врахована при розрахунках ефективних мас і деформаційних потенціалів, а також залежності ширини забороненої зони від складу x твердого розчину. Отримані значення точки кросовера x_c задовільно пояснюють відповідні експериментальні залежності.

Врахування внутрішніх локальних деформацій у сплавах $Ga_xIn_{1-x}P$ дозволяє пояснити їх основні оптичні характеристики, зокрема коефіцієнт заломлення.

Влияние внутренних локальных деформаций на оптические характеристики $Ga_xIn_{1-x}P$.

Виклюк Я.И., Дейбук В.Г.

Черновицкий национальный университет им.Ю.Федьковича,
ул.Коцюбинского, 2, г.Черновцы, 58012, Украина, E-mail: vyklyuk@mail.ru

Исследована электронная зонная структура твёрдых растворов $Ga_xIn_{1-x}P$ методом локального модельного псевдопотенциала при учёте несогласованности постоянных решётки. Возникающая вследствие этого локальная деформация решётки была учтена при расчётах эффективных масс и деформационных потенциалов, а также зависимости ширины запрещённой зоны от состава x твёрдого раствора. Полученные значения точки кросовера x_c удовлетворительно объясняют соответствующие экспериментальные зависимости.

Учёт внутренних локальных деформаций в сплавах $Ga_xIn_{1-x}P$ позволяет объяснить их основные оптические характеристики, в частности коэффициент преломления.

Effect of local strain on optical properties of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$.

Vyklyuk Y. I. , Deibuk V. G.

Chernivtsi National University, Kotsyubinskogo 2, Chernivtsi, 58012, Ukraine, E-mail: vyklyuk@mail.ru

The electronic band structure of solid solution $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ is calculated by the local model pseudopotential method accounting for lattices constant mismatch. Resulting local strain of the lattice was taken into account in calculations of effective masses and deformation potentials as well as in dependence of energy gap on composition x of the solid solution. Obtained crossover point x_c explains satisfactorily corresponding experimental dependence.

It is shown that calculations which include an local strain in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ alloys allows to explain their fundamental optical properties particularly refraction coefficient.

Таблиця 1. Псевдопотенціальні параметри, що використовувались при розрахунках GaP і InP.

	GaP		InP	
	Ga	P	In	P
a_0	1.485	0.0587	0.692	0.0406
a_1	6.268	7.644	5.820	9.010
a_2	62.023	1.217	14.049	1.204
a_3	0.0406	0.126	0.0798	0.114
a_4	7.9	0	3.32	0
λ^S	0.0001		0.00203	
λ^A	0.00034		0.0005	

Таблица 2. *Енергії міжзонних відстаней (eV) GaP та InP в деяких симетричних точках зони Бріллюена, ефективні маси і деформаційні потенціали при $T=0K$.*

	GaP			InP		
	Теоретичні зрахунки		Експеримен- тальні дані	Теоретичні зрахунки		Експеримен- тальні дані
	Наші	[8]		Наші	[8]	
$\Gamma_{6C} - \Gamma_{8V}$	3.06	2.88	2.86[13]	1.51	1.50	1.46[17]
$X_{6C} - X_{7V}$	4.50	4.89	5.05[14, 15]	4.42	4.50	4.62[17]
$L_{6C} - L_{4,5V}$	3.53	3.85	3.91[14, 16]	3.06	3.13	3.22[18]
$X_{6C} - \Gamma_{8V}$	2.52	2.16	2.35[15]	2.84	2.44	2.38[17]
Δ_0	0.211	–	–	0.377	–	–
m_e	0.17	–	0.127[23]	0.068	–	0.077[24]
$m_{hh}[100]$	0.42	–	0.45[23]	0.45	–	0.56[24]
a_g	-9.3	–	-9.3[9]	-6.4	–	-6.4[9]
a_v	-10.4	–	-10.6[9]	-11.6	–	-11.6[9]
a_c	-19.7	–	-19.9[9]	-18.0	–	-18.0[9]

Підписи під рисунками до статті

Виклюк Я.І., Дейбук В.Г.

Вплив внутрішніх локальних деформацій на оптичні характеристики $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$.

Рис.1. Модельні псевдопотенціали In, P в InP (a) и Ga, P в GaP (b)

Рис.2. Положення енергетичних мінімумів (в eV) зони провідності в точках Г, X и L відносно вершини валентної зони в залежності від складу x розчину $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ (T=0K).

Рис.3. Дійсна (ϵ_1) та уявна частина (ϵ_2) діелектричної функції InP (T=300K).
1, 3 – Наші розрахунки
2, 4 – Експериментальні дані [21].

Рис.4. Дійсна (ϵ_1) та уявна частина (ϵ_2) діелектричної функції GaP (T=300K).
1, 3 – Наші розрахунки
2, 4 – Експериментальні дані [21].

Рис.5. Дійсна частина коефіцієнта заломлення (n) $\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ (T=300K)
1 – Без врахування локальних внутрішніх деформацій.
2 – З врахуванням локальних внутрішніх деформацій.
3 – Експериментальні дані [22]

рис.1.

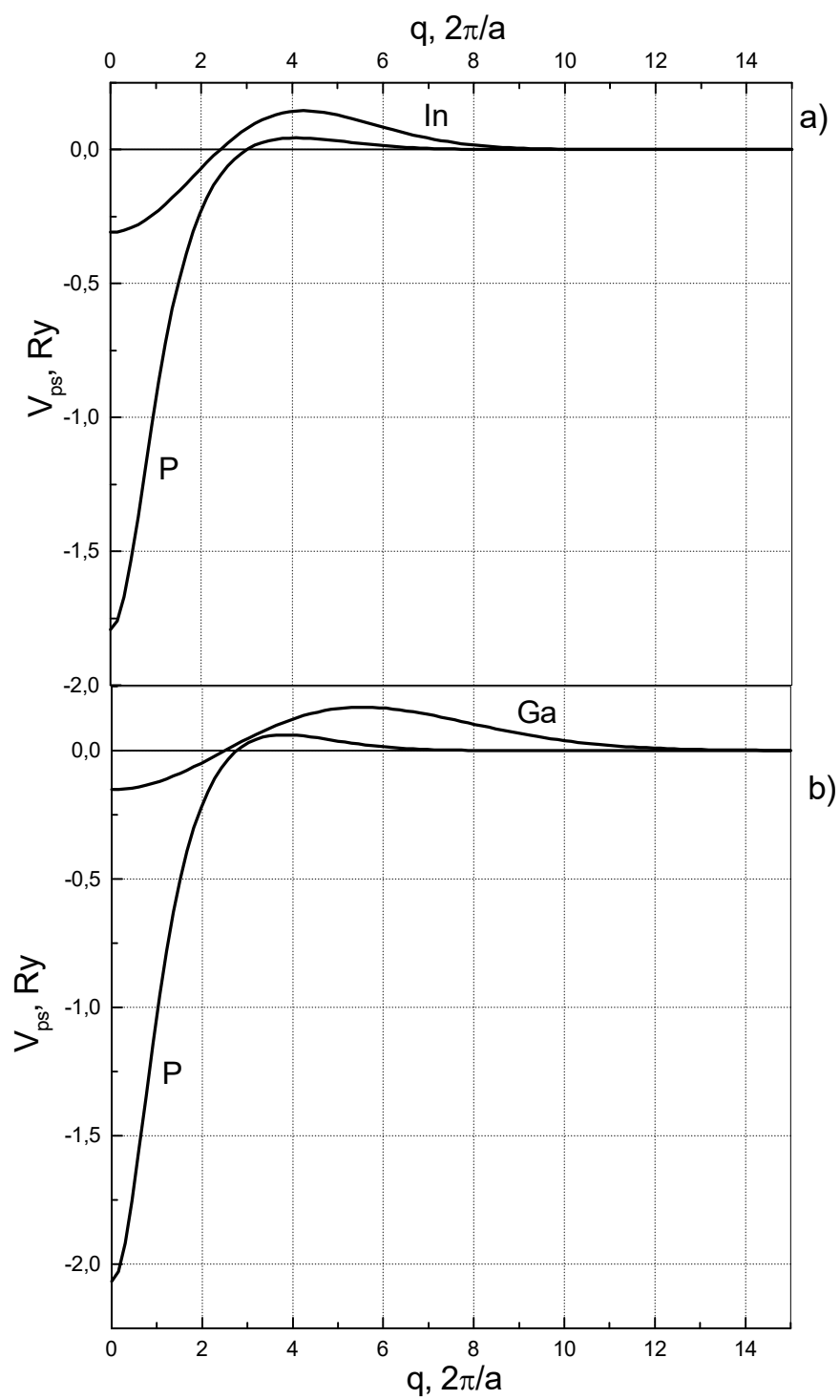


рис.2.

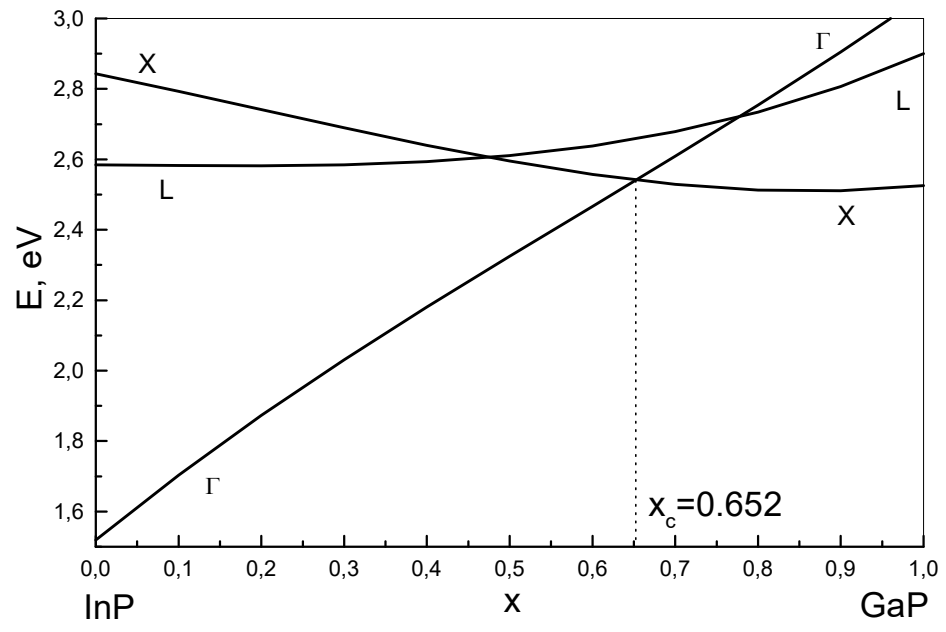


рис.3.

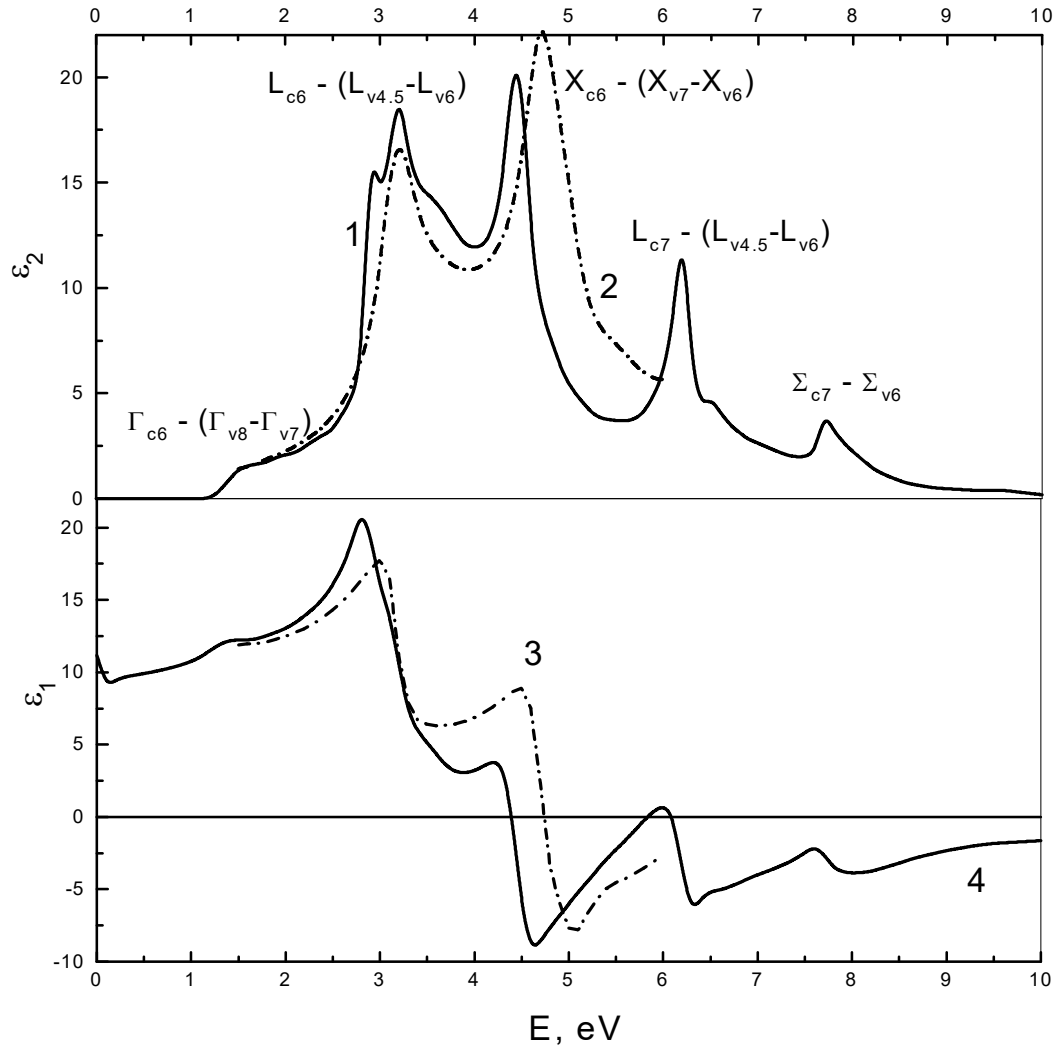


рис.4.

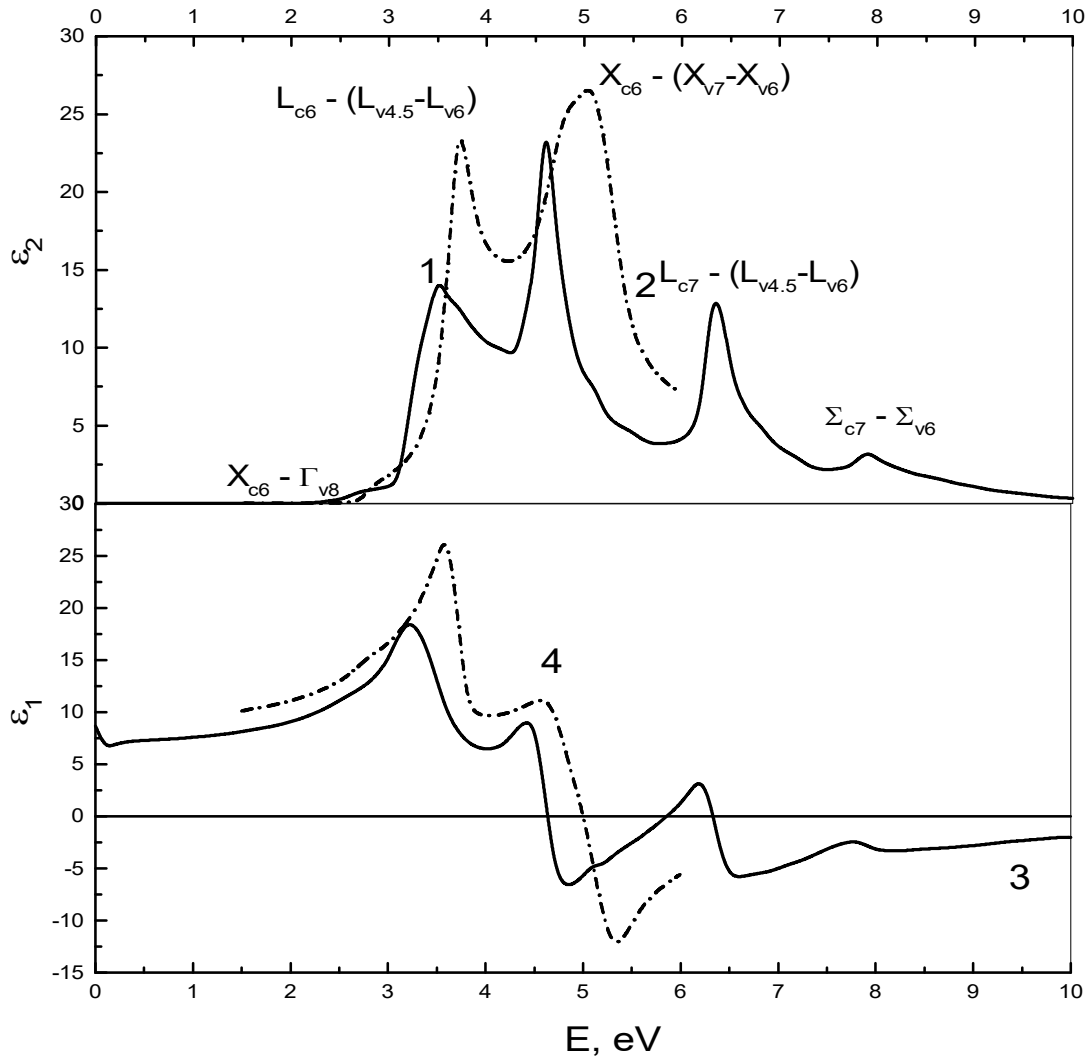
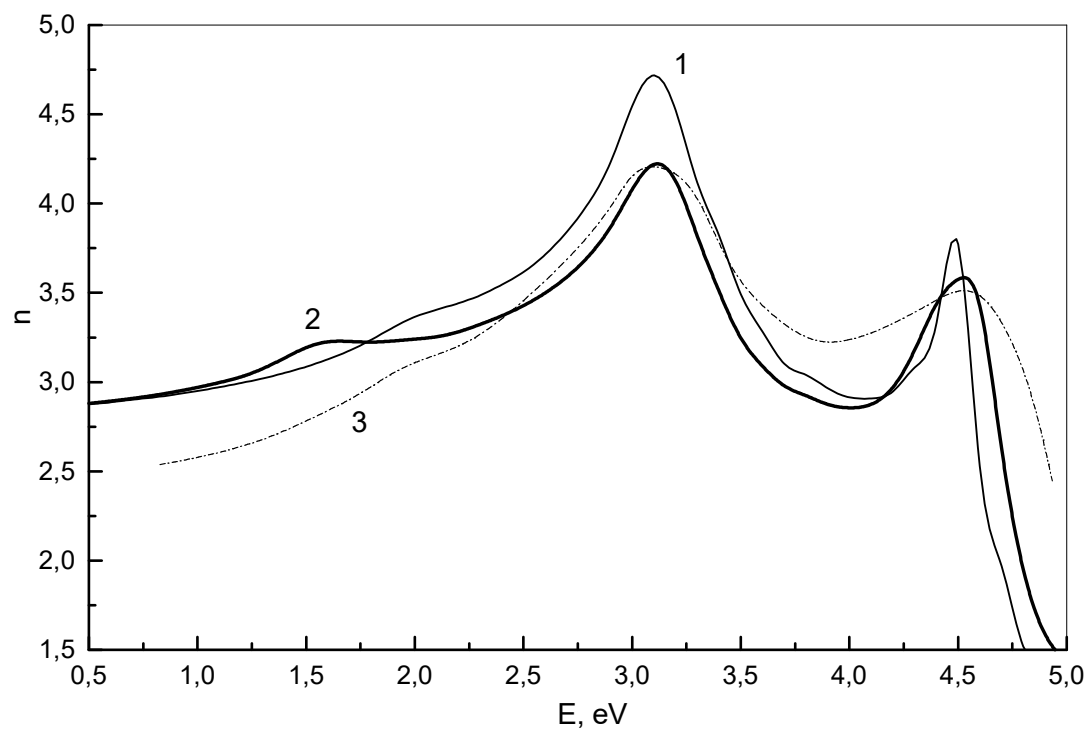


рис.5.



Адреса для листування:

Виклюк Ярослав Ігорович

вул. Гайдара 1/45

г.Чернівці, 58028

УКРАЇНА

Е-mail: vyklyuk@mail.ru, vdei@chdu.cv.ua