Ангармонизм фононов в монокристаллах Bi_2Se_3

Абдуллаев Н.А.¹, Бадалова З.И.¹, Алигулиева Х.В.^{1,2}, Аждаров Г.Х.¹

¹ Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

² Сумгаитский государственный университет, Сумгаит, Азербайджан

DOI 10.34077/Semicond2019-45

Изучено комбинационное рассеяние света в слоистых монокристаллах Bi_2Se_3 в широкой области температур 5-300К. Известно, что вклад теплового расширения в температурную зависимость частот КР-активных фононов в сильноанизотропных молекулярных кристаллах [1] и слоистых кристаллах, например GaS [2], существенно зависит от характера связей атомов в кристаллической решётке. Для фононов, частота которых определяется слабой межслоевой связью типа ван-дер-Ваальса, в основном (на 75%) изменение частоты фонона с температурой обусловлено вкладом теплового расширения, т.е. изменением параметров решётки, для внутрислоевых фононов изменение частоты фононов с температурой, главным образом, обусловлено “чистым” фонон-фононным взаимодействием.

Из исследований температурной зависимости КР-активных фононов выявлено, что вклад теплового расширения в изменение “внутрислоевых” частот E_g^2 и A_{1g}^2 с температурой достаточно велик и превышает 50%. Из этого следует, что анизотропия сил связей в Bi_2Se_3 намного меньше, чем в других халькогенидных слоистых кристаллах, например, в GaS и GaSe. Предполагается, что это возможно обусловлено сильным спин-орбитальным взаимодействием в кристаллах Bi_2Se_3 , отсутствующим в слоистых кристаллах типа GaS, вносящим свой вклад в межслоевое взаимодействие. Данные о слабой анизотропии упругих свойств кристаллов Bi_2Se_3 подтверждают это предположение.

Выявлена закономерность в зависимости величин частот КР-активных фононов в монокристаллах Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 от масс атомов. Показано, что при синфазном колебании пар атомов Se(1)-Bi в приближении линейной цепочки для низкочастотных мод E_g^1 и A_{1g}^1 можно считать массу M равной сумме масс атомов $M=m_{\text{Bi}}+m_{\text{Se}}$, а при противофазных колебаниях для высокочастотных мод E_g^2 и A_{1g}^2 масса M равна приведённой массе μ ($1/\mu=1/m_{\text{Bi}}+1/m_{\text{Se}}$). Вычислены модовые параметры Грюнайзена γ_j для мод E_g^2 и A_{1g}^2 (таблица 1).

Таблица 1. Вклад теплового расширения (TE) и фонон-фононного взаимодействия (PPI) в общее изменение величин (Total) КР-активных частот E_g^2 ($131,5 \text{ cm}^{-1}$) и A_{1g}^2 ($174,5 \text{ cm}^{-1}$) в кристаллах Bi_2Se_3 .

Мода	ω, cm^{-1} 300K	$\frac{\partial \omega}{\partial p},$ $\frac{\text{cm}^{-1}}{\text{GPa}}$	$B,$ GPa	$\alpha,$ 10^{-5}K^{-1}	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ Total	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ TE	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ PPI	η	γ_j
E_g^2	131,5	4,1	53	4,1	33,1	19,6	13,5	0,59	1,65
A_{1g}^2	174,5	2,9	53	4,1	19,6	10,6	9	0,54	0,88

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской республики (гранты № № EIF-BGM-3-BRFTF-2⁺/2017-15/02/1 и № EIF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1).

[1] R. Zallen and E.M. Conwell. *Solid State Comm.*, **31**, 557 (1979).

[2] N.A. Abdullaev, L.N. Alieva and R.A. Suleimanov. *Phys. Stat. Sol. (b)*, **129**, K13 (1985).