

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА КРАЙ СОБСТВЕННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ CdGa₂Se₄

Т.Г.КЕРИМОВА, Р.А.ГУЛИЕВ

Институт Физики НАН Азербайджана

AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33

Приводятся результаты исследования температурной зависимости коэффициента поглощения CdGa₂Se₄ в поляризованном излучении в интервале температур 5÷300К и интенсивности излучения при 4,2К и 77К. Наблюдаемые изменения поляризационной зависимости коэффициента поглощения и интенсивности излучения с понижением температуры объясняются различной скоростью движения состояний вершины валентной зоны $\Gamma_3+\Gamma_4$ и Γ_2 при изменениях тетрагонального сжатия.

Оптические спектры в области края собственного поглощения CdGa₂Se₄ исследованы ранее в [1], установлены характер оптических переходов и структура валентной зоны в $\Gamma(000)$.

В настоящем сообщении приводятся результаты исследования влияния температуры на электронные спектры в области края собственного поглощения CdGa₂Se₄. С этой целью были исследованы спектры оптического поглощения и фотолюминесценции в поляризованном излучении в интервале 4,2÷300К.

Для проведения оптических измерений были выращены монокристаллы CdGa₂Se₄ методом химических транспортных реакций. В качестве транспортера использовался кристаллический йод. Параметры решетки, определенные рентгенографическим методом, равны $a=5,571\text{Å}$, $c=10,759\text{Å}$ и $c/a=1.931$ (простр.гр. S_4^2) и согласуются с данными [2]. Совершенство монокристаллов контролировалось снятием лауэграмм. Выращенные монокристаллы имели вид трехгранных призм с естественными гранями $[\bar{1}12]$, $[1\bar{1}2]$ и $[001]$. Тетрагональная ось C с гранями $[\bar{1}12]$ и $[1\bar{1}2]$ составляет 37° . Измерения спектров поглощения и фотолюминесценции проводились на установке, собранной на базе SPM-2 и ДФС-12. В качестве источника возбуждения использовался лазер ЛПМ-11 ($\lambda=4416\text{Å}$), а в качестве источника излучения - лампа накаливания. Регистрация сигнала осуществлялась фотоэлектрическим методом с использованием системы синхронного детектирования.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На Рис.1 представлена зависимость смещения края собственного поглощения CdGa₂Se₄ от температуры в поляризованном излучении. В интервале 5÷300К зависимость смещения края поглощения от температуры носит нелинейный характер. В интервале температур 50÷300К температурный коэффициент смещения принимает отрицательные значения. Скорость смещения края собственного поглощения в интервале 50÷300К $\left(\frac{dE}{dT}\right)_I = -6,2 \cdot 10^{-4} \frac{\text{эВ}}{\text{град}}$, $\left(\frac{dE}{dT}\right)_I = -6 \cdot 10^{-4} \frac{\text{эВ}}{\text{град}}$.

При температуре ~70К наблюдается пересечение зависимостей $K \sim f(h\nu)$. В области температур 5÷40К температурные коэффициенты смещения края собственного поглощения принимают положительные значения, причем коэффициент поглощения в поляризации $\vec{E} \parallel C$ больше, чем в поляризации $\vec{E} \perp C$.

На Рис.2 представлены спектры фотолюминесценции CdGa₂Se₄ при 77К и 4,2К. Поляризационная зависимость интенсивности излучения повторяет

поляризационную зависимость коэффициента поглощения при температурах выше и ниже 70К.

Наблюдаемые температурные зависимости оптического поглощения и краевого излучения в интервале 4,2÷300К свидетельствуют об изменениях, происходящих в электронных спектрах CdGa₂Se₄.

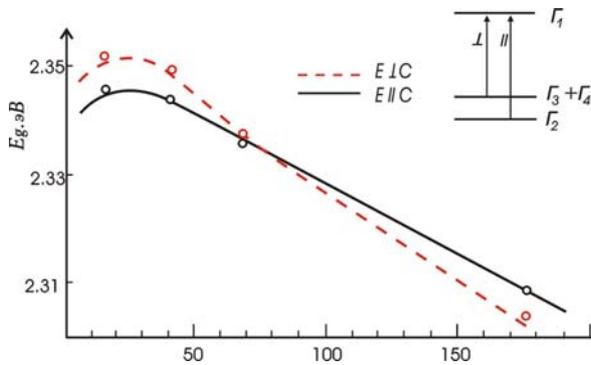


Рис.1.

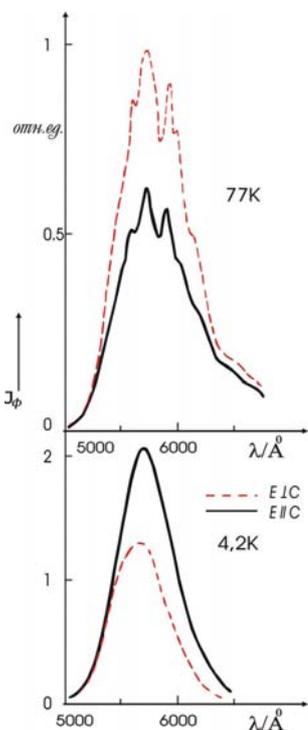
Зависимость смещения края собственного поглощения от температуры в CdGa₂Se₄, сверху-схема оптических переходов в Г(000).

Отсутствие особенностей в зависимости теплоемкости от температуры [3] и мягкой моды в спектрах комбинационного рассеяния свидетельствуют о том, что наблюдаемые изменения в оптических спектрах невозможно объяснить структурными фазовыми переходами. Однако, изменение поляризационной

зависимости спектров фотолюминисценции можно объяснить исходя из структуры электронных спектров, формирующих вершину валентной зоны и дно зоны проводимости. На Рис.1а представлена схема оптических переходов в области минимальных межзонных переходов в Г(000). В дипольном приближении вершина валентной зоны состоит из двух подзон, Г₂ и Г₃+Г₄, расстояние между которыми определяется кристаллическим расщеплением (Δ_{кр}). Поскольку кристаллическое расщепление в CdGa₂Se₄ обусловлено разностью псевдопотенциалов атомов катионной подрешетки и тетрагональным сжатием решетки вдоль оси С, то можно было бы полагать, что с уменьшением температуры от 300К до 5К из-за деформации решетки изменяются параметры *a* и *c*, приводя к изменению тетрагонального сжатия $\left(2 - \frac{c}{a}\right)$, которое может привести к перестройке электронного спектра.

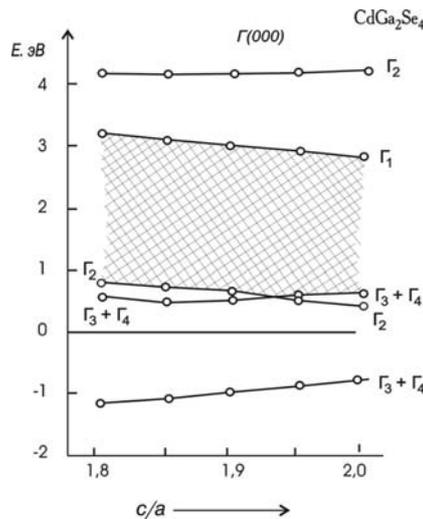
Рис.2.

Спектральная зависимость интенсивности излучения при 77К и 5К.



В тетрагональных соединениях A²B₂C₄⁶ (пр. гр. S₄²) имеет место сжатие решетки $\left(\frac{c}{a} \neq 2\right)$ вдоль тетрагональной оси С. В результате сжатия решетки вдоль оси С имеют место искажения в первой координационной сфере, которые не приводят к изменению симметрии решетки, а изменяют межатомные связи и валентные углы. Поэтому изменение параметров решетки можно рассматривать, как дополнительное возмущение в энергетическом спектре.

Для проверки этих предположений были проведены расчеты энергетического положения уровней валентной зоны и зоны проводимости в



зависимости от величины сжатия решетки. Расчеты были проведены методом псевдопотенциала. Оказалось, что дно зоны проводимости в точках $\Gamma(000)$, $N\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$ и $T(001)$ и вершине валентной зоны в точках N и T слабо зависит от параметра c/a . Наибольшие изменения наблюдаются для состояний, формирующих вершину валентной зоны в $\Gamma(000)$ (Рис.3).

Рис.3.

Зависимость энергетического положения состояний вершины валентной зоны и для зоны проводимости в $\Gamma(000)$ от величины тетрагонального сжатия $\left(2 - \frac{c}{a}\right)$.

Двухкратновырожденный уровень $\Gamma_3+\Gamma_4$ при увеличении сжатия решетки смещается вниз по шкале энергий, а невырожденный уровень Γ_2 поднимается. Следовательно, деформационные потенциалы состояний Γ_2 и $\Gamma_3+\Gamma_4$ различаются по величине и знаку. Исходя из вышеизложенного, можно сделать вывод, что при температурах выше и ниже 70К верхний уровень валентной зоны формируется состояниями $\Gamma_3 + \Gamma_4$ и Γ_2 , соответственно.

1. Т.Г.Керимова, Ш.С.Мамедов, Н.М.Мехтиев, Р.Х.Нани, *ФТП*, **13** (1979) 494.
2. H.Hahn, G.Frank, W.Klinger, A.Stoerger, S.Stoerger, *Z.s. anorganische allgemeine Chemie*, **279** (1955) 241.
3. K.K.Mamedov, M.M.Aliev, Y.G.Kerimov, R.Kh.Nani, *Phys. Stat. Sol (a)*, **9** (1972) K149.

CdGa₂Se₄-də OPTİK UDULMA SƏRHƏDİNƏ TEMPERATURUN TƏSİRİ

T.Q.KƏRİMOVA, R.Ə.QULİYEV

CdGa₂Se₄-nin polyarlaşmış işıqda 5÷300K temperatur intervalında udma əmsalının və 4,2÷77K temperatur intervalında şüalanma intensivliyi-nin temperaturdan asılılığının öyrənilməsi istiqamətində aparılan tədqiqat-ların nəticələri göstərilir. Temperaturun düşməsi ilə udma əmsalı və şüalanma intensivliyinin polyarizasiyadan asılılığının dəyişilməsinin müşahidə olunması tetraqonal sıxılmanın dəyişilməsi nəticəsində valent zonasının maksimumları Q₃+Q₄ və Q₂-nin hərəkət sür'ətlərinin müxtəlifliyi ilə izah olunur.

TEMPERATURE EFFECT ON OPTICAL ABSORPTION EDGE of CdGa₂Se₄

T.G.KERIMOVA, R.A.GULIYEV

Results of investigations of the temperature dependence of absorption coefficient of CdGa₂Se₄ in polarized light in temperature range of 5÷300K and intensity of radiation in 4,2÷77K have been presented. Observed changes of polarized dependence of absorption coefficient and intensity of radiation with decrease of temperature have been explained by difference of velocity of motion of states of the valence band top $\Gamma_3+\Gamma_4$ and Γ_2 in changes of tetragonal distortion.

Редактор: М.Алиев