

## ОБ ОДНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ АНОМАЛИИ В СПЕКТРАХ СЛОИСТЫХ ПРИМЕСНЫХ КРИСТАЛЛОВ $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$

*Я.О.Довгий, Я.М.Билый, А.М.Козак*

Исследуемые кристаллы выращены методом Киропулоса в атмосфере гелия [1]. Они принадлежат к слоистым структурам. Образцы, сколотые по плоскостям спайности, представляли собой плоско-параллельные пластинки с зеркальными поверхностями хорошего качества. Ось  $z$  перпендикулярна слоям, т. е. свет распространялся вдоль симметричного направления кристалла. Измерения спектров проводились в интервале температур 77 - 300К на кристаллах  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (1%) ( $d = 8$  мкм) и  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (0,1%) ( $d = 53$  мкм). Поскольку ионные радиусы  $\text{Br}^{-1}$  и  $\text{J}^{-1}$  значительно отличаются (соответственно, 1,96 и 2,20Å) и при весовой концентрации иода в 1% решетка  $\text{CdBr}_2$  искажена, мы анализируем лишь спектры  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (0,1%) ( $N = 8,54 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ).

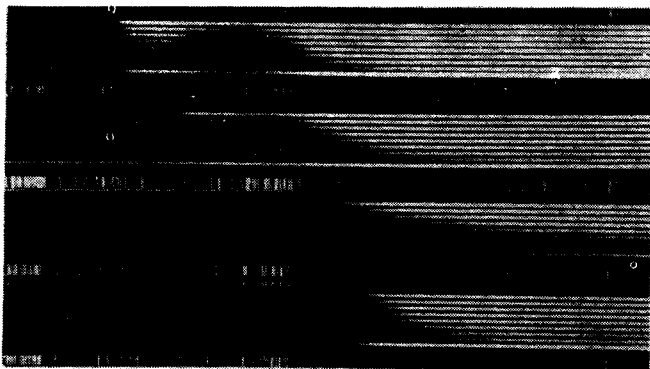


Рис. 1. Спектры поглощения кристаллов  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (0,1%) при 77, 122, 164 и 300К

На рис. 1 видна следующая особенность: при 77К наблюдается отчетливая примесная полоса и резкий край поглощения. Полоса смещена ниже края на величину  $\delta E = 0,175 \text{ эв}$ . Повышение температуры приводит к размытию обеих частей спектра, а при комнатной температуре опять виден резкий край. Эта аномалия обусловлена различным поведением фундаментального и примесного спектров. В литературе мы не нашли сведений о поглощении чистых монокристаллов  $\text{CdBr}_2$ . Поэтому для разделения указанных деталей были отдельно измерены спектры  $\text{CdBr}_2$  при разных температурах. В качестве иллюстрации на рис. 2 сопоставлены спектры примесного (точки) и чистого (пунктир) кристаллов. Участки легко разделяются.

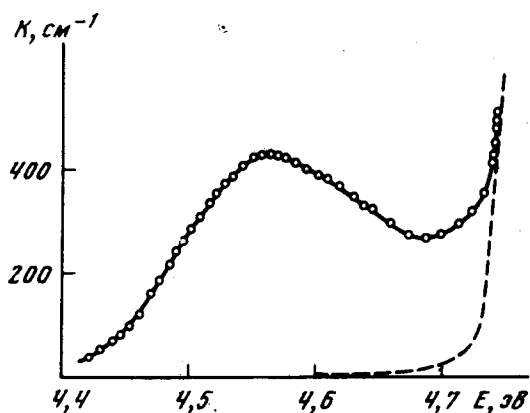


Рис. 2. Кривые поглощения кристаллов  $\text{CdBr}_2$  (-----) и  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (0,1%) (o-o-o-o-) при 77К

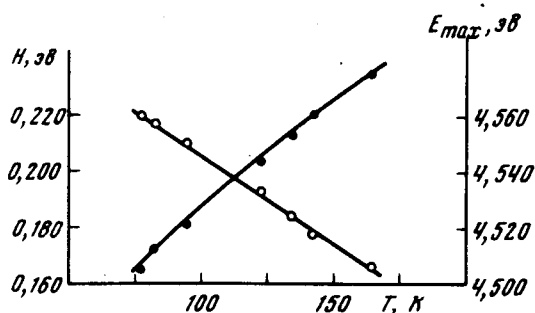


Рис. 3. Температурные изменения параметров примесной полосы

Температурные изменения параметров примесной полосы показаны на рис. 3. Зависимость  $H(T)$  описывается функцией [ 2 ]

$$H(T) = H(0) \left[ \text{cth} \frac{E_{\Phi}}{2kT} \right]^{1/2} \quad (1)$$

при  $H(0) = 920 \text{ см}^{-1}$  и  $E_{\Phi} = 6,8 \text{ мэв}$  ( $55 \text{ см}^{-1}$ ). Температурное смещение максимума полосы  $E(T)$  определяется, как известно, двумя факторами: электрон-фононным взаимодействием и термическим расширением решетки:

$$E_m(T) = E_m(0) \exp \left[ A \left( 1 - \text{cth} \frac{E_{\Phi}}{2kT} \right) - \int_0^T \frac{\beta}{K} \left( \frac{dE_m}{dP} \right)_T dT, \right]$$

где  $E_m(0)$  – положение максимума полосы, экстраполированное к 0К,  $E_{\Phi}$  – энергия актуальных фононов,  $\beta$  – объемный коэффициент термического расширения,  $K$  – изотермическая сжимаемость,  $A$  – константа ( $A \ll 1$ ). Наш анализ параметров полосы относится к области невысоких температур (77 – 170К), когда преобладают однофононные процессы.

Учтя (1) и малость  $A$ , запишем:

$$E_m(T) \approx E_m(0) + E_1 \left( 1 - \text{cth} \frac{E_{\Phi}}{2kT} \right) - B \Delta E_T(T) =$$

$$= E_m(0) - E_1 \left( \frac{H^2(T)}{H^2(0)} - 1 \right) - B \Delta E_T(T). \quad (2)$$

Функция  $\Delta E_T(T)$  взята нами из работы [3], где она найдена для слоистого кристалла  $\text{PbJ}_2$ . Поправочный коэффициент  $B$  учитывает отличие  $\beta$ ,  $K$  и  $(dE_m/dP)_T$ . Экспериментальная кривая  $E_m(T)$  аппроксимируется зависимостью (2) с параметрами:  $E_m(0) = 4,581$  эв,  $E_1 = 5,44 \cdot 10^{-2}$  эв и  $B = -2,371$ .

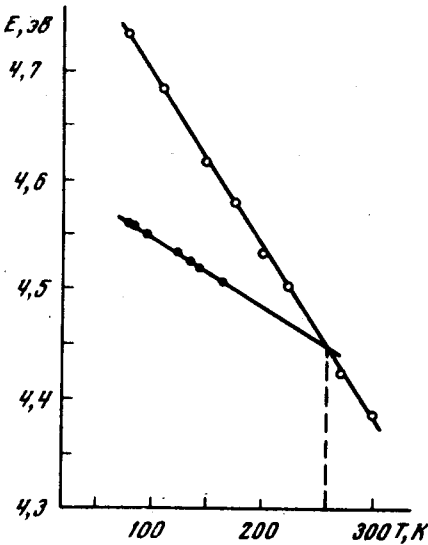


Рис. 4. Температурные смещения примесной полосы и края собственного поглощения системы  $\text{CdBr}_2 - \text{J}_2$  (0,1%)

Таким образом, температурные коэффициенты смещения примесной полосы и края поглощения не совпадают. Для интервала 77 – 200К  $\Delta E_g/\Delta T = -1,52 \cdot 10^{-3}$  эв/град,  $\Delta E_m/\Delta T = -6,21 \cdot 10^{-4}$  эв/град. Это приводит к тому, что при 256К спектры перекрываются, а далее примесный пик "теряется" на фоне фундаментальной полосы (рис. 4). Важно указать, что при 300К длинноволновое крыло примесной полосы еще должно быть заметным ниже края поглощения (экстраполяция функции  $H(T)$ <sup>1)</sup>, а на самом деле край становится резким. Происходит своеобразная "перекачка" силы осциллятора от примеси к основе. Этот интересный (на эксперименте довольно редкий) факт обусловлен, очевидно, близостью примесного уровня и зоны. В связи с этим можно ожидать смещения конфигураций подсистем (собственная решетка и примесь). В литературе эти вопросы подробно исследованы для молекулярных кристаллов [4]. В случае слоистых кристаллов данный эффект наблюдается впервые<sup>2)</sup>.

<sup>1)</sup> Реальная полуширина  $H$  при 300К превышает экстраполированную по (1) из-за возможного включения многофононного механизма.

<sup>2)</sup> Если в молекулярных кристаллах для изменения  $\delta E$  приходится менять состав кристалла, то здесь измерения ведутся на одном и том же образце, поскольку  $\delta E$  зависит от  $T$  (рис. 3).

Сближение примесного уровня и зоны может привести к температурным изменениям силы осциллятора  $f$  примесного поглощения в противовес традиционной теории. Для двух температур (77 и 122К), когда полоса надежно прорабатывается (см. рис. 1,а), мы нашли  $f$  по формуле Смакулы – Декстера [ 5] (контур гауссовский):

$$f = 0,87 \cdot 10^{17} \frac{1}{N} \frac{n}{(n^2 + 2)^2} a_m H, \quad (3)$$

где  $a_m$  – коэффициент поглощения в максимуме полосы (в  $см^{-1}$ ), а  $H$  – в эв. Показатели преломления  $n$  при данных температурах измерялись нами интерференционным методом. Получено:  $f^{(77К)} = 4,36 \cdot 10^{-3}$  и  $f^{(122К)} = 4,13 \cdot 10^{-3}$ . Действительно, в меру приближения к фундаментальному краю примесная полоса истощает.

Львовский  
государственный университет

Поступила в редакцию  
10 августа 1976 г.

### Литература

- [ 1 ] Я.О.Довгий, Н.С.Пидзырайло, М.И.Брилинский, С.П.Кудрявец. Укр. физич. журнал, 14, 1804, 1969.
  - [ 2 ] J. J. Markham. Rev. Mod. Phys., 31, 956, 1959.
  - [ 3 ] В.В.Мусил, В.К.Милославский, В.В.Кармазин. ФТТ, 17, 859, 1975.
  - [ 4 ] Э.И.Рашба. ФТТ, 4, 3301, 1962; В.Л.Броуде, Э.И.Рашба, Е.Ф.Шека. ДАН СССР, 139, 1085, 1961.
  - [ 5 ] D. L. Dexter. Phys. Rev., 101, 48, 1956.
-