

Н. Н. ЖАНТУРИНА¹, К. Ш. ШУНКЕЕВ², Б. А. АЛИЕВ¹

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Республика Казахстан,

²Актюбинский государственный педагогический институт, Актобе, Республика Казахстан)

**ВОЗДЕЙСТВИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРОЦЕССЫ
АННИГИЛЯЦИИ ЭКСИТОНОВ В КРИСТАЛЛАХ KI, KBr, KCl И CsI ПРИ
ПОНИЖЕНИИ СИММЕТРИИ РЕШЕТКИ
ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ**

Аннотация

В статье на основе введения флуктуирующего потенциала Тойозавы и термического расширения кристаллической решетки получена зависимость потенциального барьера автолокализации экситонов от температуры. С помощью поверхности адиабатического потенциала экситонов в щелочногалогидных кристаллах показано уменьшение высоты автолокализационного барьера экситонов в кристаллах KI, KBr, KCl и CsI при увеличении температуры и степени одноосного сжатия. Полученные результаты согласуются с экспериментальным фактом усиления люминесценции автолокализованных экситонов при действии температуры и деформации, а также температуры полного перехода экситонов в автолокализованное состояние для рассматриваемых кристаллов совпадают с экспериментальными данными.

Ключевые слова: экситон, щелочногалогидный кристалл, одноосная деформация, флуктуирующий потенциал, автолокализация, потенциальный барьер.

Кілт сөздер: экситон, сілтілі галогидты кристалл, бірості деформация, флуктуациялық потенциал, тұрақталу, потенциалды бөгет.

Keywords: exciton, alkali halide crystal, uniaxial deformation, fluctuation potential, self-trapping, potential barrier.

Распределение каналов аннигиляции экситонов в щелочногалогидных кристаллах сильно зависит от температуры и приложения деформации. При одновременном воздействии обоих факторов могут наблюдаться такие явления, как изменение потенциального барьера между двумя каналами аннигиляции экситона, усиление или тушение люминесценции, рост дефектообразования. По существующим теоретическим данным одноосное сжатие стимулирует интенсивность люминесценции автолокализованных экситонов (АЛЭ), объясняемое уменьшением высоты

автолокализационного барьера (АЛБ) [1]. По-видимому, данная интерпретация имеет место при тех температурах ($4,2 \rightarrow 80$ К), при которых существует потенциальный барьер для автолокализации свободных экситонов, так как с ростом температуры возрастает число экситонов, переходящих в автолокализованное состояние. [2]. Детальное объяснение природы этого явления и расчет высоты потенциального барьера в зависимости от температуры можно дать с помощью введения понятия флуктуирующего потенциала, индуцированного фононами.

Спектр одноэлектронных состояний кристалла определяется решением уравнения Шредингера для экситона [3]:

$$A = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - V, \quad (1)$$

где A – кинетическая энергия экситона, \hbar – приведенная постоянная Планка, $k = \frac{3\pi}{a}$ – волновой вектор экситона, a – постоянная решетки, m – эффективная масса экситона, V – периодический потенциал, обусловленный экситон-фононным взаимодействием.

Периодический потенциал назван Тойозавой потенциалом возмущения поля движущегося экситона, равный:

$$D = \sqrt{2Bk_B T}, \quad (2)$$

где $B = \frac{E_d^2}{2\beta a^3}$ – энергия релаксации решетки (выигрыш энергии при релаксации решетки вокруг экситона), k_B – постоянная Больцмана, T – температура.

Используя (1) и (2) выражение для высоты потенциального барьера автолокализации экситонов в ЦГК, запишем следующим образом [1]:

$$E = \frac{4(A-D)^3}{27B^2} \left(1 - 3\frac{BC}{A^2}\right)^{3/2}, \quad (3)$$

где $C = \frac{e^2}{\varepsilon' a}$ – вклад оптических фононов в энергию релаксации решетки.

При росте температуры изменяется каждая из величин, входящих в выражение (3) вследствие увеличения постоянной решетки. Температурную зависимость постоянной решетки находим из следующих соображений квантовой механики.

При достаточно низких температурах, когда энергия теплового движения $k_B T$ намного меньше ширины экситонной зоны A большинство экситонов находится в пространстве волновых векторов k_0 , при увеличении температуры меняется волновой вектор экситона, и его отклонение от начального значения χ можно найти по следующей формуле [2]:

$$k = k_0 - \chi. \quad (4)$$

Считая газ экситонов невырожденным электронным газом, применяя к закону сохранения энергии бoльцмановскую статистику, отклонение волнового вектора от начального значения запишем в виде следующего выражения:

$$\chi = \frac{j}{\hbar} \sqrt{3mk_B T}, \quad (5)$$

где j – параметр, зависящий от термического влияния на межатомные или межионные расстояния. Для щелочногалогидных кристаллов он варьирует в пределах от 0,01 до 0,1.

Используя выражения (4) и (5), температурную зависимость постоянной решетки находим по формуле:

$$a = \frac{a_0 \hbar \sqrt{\pi}}{\hbar \sqrt{\pi} - a_0 j \sqrt{mk_0 T}}, \quad (6)$$

где a_0 – постоянная решетки при 0 К.

Расчеты согласно выражению (6) доказывают увеличение межионного расстояния с ростом температуры и согласуются с экспериментальными данными [3].

Используя выражения (3), (6) и зависимость A, B, C от постоянной решетки получаем:

$$E_a(T) = \frac{4 \left(A \left(\frac{a_0}{a} \right)^2 - D \right)^3}{27 B^2 \left(\frac{a_0}{a} \right)^6} \left(1 - 3 \frac{BC}{A^2} \right)^{3/2}. \quad (7)$$

От температуры зависят кинетическая энергия экситона и энергия релаксации решетки. Они входят в функционал поверхности адиабатического потенциала:

$$E = A\mu^2 - B\mu^3 - C\mu, \quad (8)$$

где E – энергия экситонного состояния, μ – отношение постоянной решетки к радиусу области локализации. Энергетическая разность между минимумом и максимумом функционала (8) позволяет судить о величине АЛБ. На примере некоторых ЩГК построены поверхности адиабатического потенциала при разных температурах (рисунок 1). Кривые поверхности адиабатического потенциала с отсутствием изгибов и точек экстремума свидетельствуют о безбарьерной автолокализации экситонов в ЩГК.

В кристалле КСl все экситоны автолокализуются безбарьерно даже при 4 К, и рост температуры влияет только на энергию электронного состояния. В кристалле КI потенциальный барьер автолокализации экситонов является одним из наибольших, и возрастание температуры с шагом 10 К способствует его уменьшению примерно на 0,01 мэВ. В районе температур 60–80 К поверхность адиабатического потенциала начинает сглаживаться, что говорит о падении АЛБ до незначительной величины.

По существующим данным высота потенциального барьера автолокализации экситонов в кристаллах КВг и CsI соответственно 0,09 мэВ и 0,11 мэВ, что гораздо меньше

чем в вышеопи-санных кристаллах. Поэтому в районе температур 15–20 К энергетическая разность между электронными состояниями составляет порядка 0,001 мэВ и уже при 30 К экситоны автоло-кализуются безбарьерно. В кристалле CsI поверхности адиабатического потенциала расположены выше, чем в других ЦГК, так как кинетическая энергия экситона является наибольшей.

Таким образом, из теоретических выкладок и построенных поверхностей адиабатического потенциала можно сделать вывод о том, что повышение температуры ведет к падению высоты АЛБ.

На основе континуального приближения и температурной зависимости высоты АЛБ рассмотрим изменение потенциального барьера автолокализации экситонов при одновременном действии деформации и температуры.

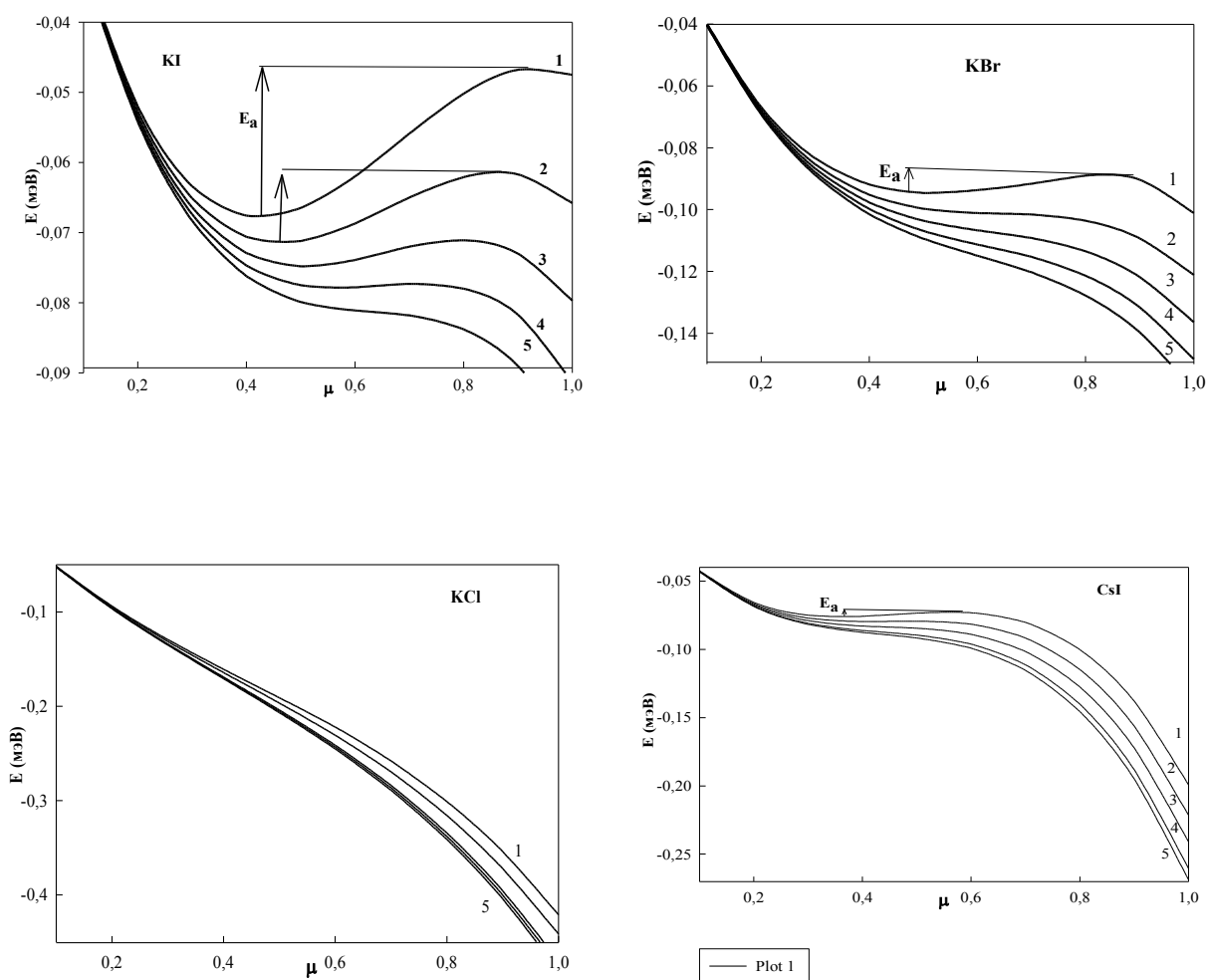


Рисунок 1 – Поверхность адиабатического потенциала в кристаллах KI, KBr, KCl, CsI

(1, 2, 3, 4, 5 соответственно – при 4,2 К, 20 К, 40 К, 60 К, 80 К)

С учетом выкладок, раскрывающих влияние анизотропии на высоту и другие свойства АЛБ, в работе [6], величины A , B , C могут быть записаны в следующем виде при одноосной деформации:

$$A' = \frac{(2 + 1/\varepsilon^2)}{3} A, \quad B' = \frac{1}{\varepsilon^{7/3}} B, \quad C' = \frac{(2 + \varepsilon)}{3} C, \quad (8)$$

где $\varepsilon = \frac{a}{a_0}$ – степень относительного одноосного сжатия, показывающая отношение постоянной решетки при деформации к исходной.

Кристалл KI вообще является очень удобным для экспериментальных исследований, так как считается, что в нем наиболее заметны явления усиления интенсивности люминесценции. На рисунке 2 приведены поверхности адиабатического потенциала для этого кристалла при разных температурах и степенях относительной деформации. Приложение одноосного сжатия при увеличении температуры способствует уменьшению высоты потенциального барьера автолокализации экситонов. Так, например, в кристалле KI при 80 К при уменьшении ε с 0,98 до 0,9 высота барьера изменяется от 0,017 до 0,00118 эВ, т.е. на 93,33%, а при 10 К – на 93,24%. Из этих результатов полагаем, что с ростом температуры при одновременном действии деформации уменьшение потенциального барьера автолокализации экситонов является более существенным. Значительное изменение высоты АЛБ (90–95%) при увеличении сжатия до 10% подтверждено в континуальной теории [4]. Из графика также видно преобладающее влияние действия одноосной деформации на высоту АЛБ по сравнению с температурой. При деформации $\varepsilon = 0,98$ в интервале 10-80 К высота потенциального барьера автолокализации экситонов уменьшается на 19%, что идентично действию низкотемпературной одноосной деформации до 2%.

Повышение температуры от 4,2 до 80 К при одноосной деформации 0,98 способствует уменьшению высоты АЛБ на 21%, что значительно, чем в иодидах щелочных металлов [5].

Таким образом, при одновременном повышении температуры от 4,2 до 80 К и действии деформации высота АЛБ в щелочногалогенидных кристаллах уменьшается, причем влияние температуры менее существенно по сравнению с одноосным сжатием.

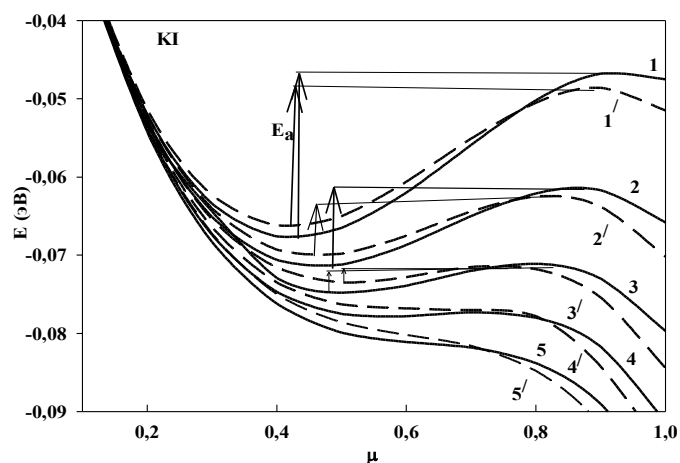


Рисунок 2 – Поверхность адиабатического потенциала в кристалле KI

(1, 2, 3, 4, 5 соответственно – при 4,2 К, 20 К, 40 К, 60 К, 80 К, штриховые – при деформации 2 %)

Падение высоты потенциального барьера автолокализации экситонов подтверждается экспериментальным фактом тушения люминесценции при увеличении температуры и сравнительным преобладанием безызлучательного канала аннигиляции.

ЛИТЕРАТУРА

1 Тулепбергенов С.К. Автолокализация экситонов в континуальной модели щелочногалогидных кристаллов // Вестник КазГУ. Сер. физ. – 2001. – № 2(11). – С. 93-100.

2 Агранович. В.М. Теория экситонов. – М.: Изд-во «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1968.

3 Song K.S., Williams R.T. Self-Trapped Excitons // Springer series in Solid-State Sciences. – Vol. 105. – Berlin: Springer-Verlag, 1993.

4 Шункеев К.Ш., Эланго А.А., Сармуханов Е.Т., Бекешев А.З., Тулепбергенов С.К., Сагимбаева Ш.З. Эффект разгорания люминесценции автолокализованных экситонов одноосно сжатых щелочногалогидных кристаллов // Проблемы спектроскопии и спектрометрии / Межвуз. сб. науч. трудов. – Екатеринбург: УГТУ, 2000. – Вып. 5. – С. 119-128.

5 Shunkeyev K., Myasnikova L., Barmina A., Sagimbaeva Sh. Effect of intrinsic luminescence of alkali halide amplification by low temperature deformation // Journal of Physics: Conference Series. – 2012. – Vol. 400. – 042002.

REFERENCES

- 1 Tulepbergenov S.K. *Vestnik KazGU, seryia physicheskaya.* -2001.-№2(11). (in Russ.)
- 2 Agranovich V.M. *Teoria eksitonov. Izdatelstvo «Nauka», 1968,* (in Russ.)
- 3 Song K.S., Williams R.T. *Self-Trapped Excitons, Springer series in Solid-State Sciences,* Vol. 105, 1993 (in Eng.)
- 4 Shunkeyev K.Sh., Elango A.A., Sarmuhanov E.T., Bekeshev A.Z., Tulepbergenov S.K., Sagimbaeva Sh.Z. *Problemi spektrometrii I spektroskopii. Mezhvuzovski sbornik nauchnih trudov, 2000.* Vypusk 5 (in Russ.)
- 5 Shunkeyev K., Myasnikova L., Barmina A., Sagimbaeva Sh. *Journal of Physics: Conference Series.* -2012.- V 400, 042002 (in Eng.)

Резюме

Н. Н. Жантурина¹, К. Ш. Шункеев², Б. А. Алиев¹

¹әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан Республикасы,

²Ақтөбе мемлекеттік педагогикалық институты, Ақтөбе, Қазақстан Республикасы)

БІРОСТІ ДЕФОРМАЦИЯМЕН ТОР СИММЕТРИЯСЫ ТӨМЕНДЕТІЛГЕНДЕ ТЕМПЕРАТУРАНЫҢ

КІ, КВг, КСІ және CsI КРИСТАЛДАРЫНДАҒЫ ЭКСИТОНДАР АННИГИЛЯЦИЯСЫНА
ӘСЕР ЕТУІ

Мақалада Тойозаваның флуктуациялайтын потенциалын енгізу және кристалдық тордың термиялық кеңеюі негізінде экситондардың тұрақталу бөгетінің температурадан тәуелділігі анықталды. Адиабатикалық потенциал беті арқылы КІ, КВг, КСІ және CsI кристалдарында температура және деформация деңгейі артқанда экситондардың тұрақталу бөгетінің биіктігінің төмендеуі көрсетілді. Алынған нәтижелер температура және деформация әсер еткендегі сілтілі галоидты кристалдарда люминесценция күшейюімен дәлелденеді, және де экситондардың толықтай тұрақталған күйге көшу температуралары эксперименталдық мәлімет-термен сәйкес келеді.

Кілт сөздер: экситон, сілтілі галоидты кристалл, бірості деформация, флуктуациялық потенциал, тұрақ-талу, потенциалды бөгет.

Резюме

N. N. Zhanturina¹, K. Sh. Shunkeyev², B. A. Aliev¹

¹al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Republic of Kazakhstan,

²Aktobe State Pedagogical Institute, Aktobe, Republic of Kazakhstan)

THE TEMPERATURE INFLUENCE ON PROCESSES OF EXCITONS ANNIHILATION
IN CRYSTALS KI, KBr, KCl AND CsI AT LATTICE SYMMETRY LOWERING BY
UNIAXIAL STRESS

The dependence of the potential barrier of self-trapping of excitons on the temperature was obtained in the article by entering of Toyozawa fluctuation potential and thermal expansion of the crystal lattice. Was shown decreasing of the height of the self-trapping excitons potential barrier in KI, KBr, KCl and CsI with temperature and uniaxial compression increasing by the excitons adiabatic potential surface. These results are consistent with the experimental fact of self-trapped excitons luminescence enhancement at the effects of temperature and strain as well as a full transition temperature of excitons in self-trapped state of the these crystals.

Keywords: exciton, alkali halide crystal, uniaxial deformation, fluctuation potential, self-trapping, potential barrier.

Поступила 5.07.2013г.