

АНОМАЛИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
МОНОКРИСТАЛЛА $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ Л.Г.ГАСАНОВА, А.З.МАГОМЕДОВ
Бакинский Государственный Университет

В данной работе исследовано влияние гидростатического давления на край полосы поглощения монокристалла $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$. Определен барический коэффициент ширины запрещенной зоны. Особенности, наблюдаемые на оптических спектрах под действием давления, связаны с фазовыми переходами.

Исследование влияния всестороннего сжатия на край полосы собственного поглощения твердых тел позволяет определить изменение ширины запрещенной зоны с давлением и, в ряде случаев, уточнить детали зонной структуры. Кроме того, эти результаты могут оказаться полезными и в другом аспекте – с точки зрения обнаружения структурных фазовых переходов, наведенных давлением.

В настоящей работе представлены результаты экспериментов по влиянию гидростатического давления на спектры краевого поглощения нового тройного полупроводникового соединения $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$, которые получены в результате исследования диаграммы состояния системы $\text{CuInS}_2 - \text{In}_2\text{S}_3$ [1]. Температура плавления полученного соединения 1080 С. Оно обладает слоистой структурой и кристаллизуется в моноклинной структуре с параметрами $a=6.60$; $b=6.91$; $c=8.12$ Å; $\beta=89$; $Z=1$ [1]. Как видно, параметры элементарной ячейки таковы, что их можно рассматривать как кристаллы квазитетрагональной сингонии. Измерения фотопроводимости показали, что они являются чувствительными кристаллами в области 0.8-1.8 эВ, что делает их перспективными материалами для оптоэлектроники [2]. В работе [3] исследован край полосы поглощения при температурах 293 К и 77 К. Резкий рост коэффициента поглощения свидетельствует о том, что край полосы поглощения формируется прямыми переходами. Определена ширина запрещенной зоны из зависимости $\alpha^2 \sim f(h\nu)$, соответствующая прямым оптическим переходам, которая равна 1.45 эВ и 1.58 эВ при 293 и 77К, соответственно. При $h\nu=1.60$ эВ у края наблюдается пик, который связан с основной решеткой кристалла, т.е. он обусловлен экситонным механизмом поглощения. Спектральная зависимость коэффициента поглощения для образцов $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ с толщиной 100-200 мкм, хорошо описывается соотношением для непрямых разрешенных переходов в области слабого поглощения ($\alpha \sim 50 - 150 \text{ см}^{-1}$).

Барическая зависимость спектров поглощения $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ исследовались при комнатной температуре в интервале давлений $0 \div 8$ кбар. Исследуемые кристаллы были выращены методом Бриджмена в эвакуированных кварцевых ампулах. Слоистость кристаллов позволяла путем легкого скалывания из монокри-

сталлического блока получить плоскопараллельные пластинки хорошего оптического качества, толщиной 100-200 мкм. Давление измерялось манганиновым манометром сопротивления с погрешностью не более ± 150 бар. Температура в камере высокого давления контролировалась с помощью хромель-алюмелевой термопары. Погрешность измерения температуры не превышала ± 2 К. Соблюдалась выдержка по давлению после установления следующего давления не менее 3ч, что гарантировало проведение экспериментов в равновесных условиях. Установка для измерения оптического поглощения при высоком давлении была собрана на базе монохроматора ЗМР-3. Регистрация спектров пропускания проводилась фотоумножителем ФЭУ-39. Разрешение установки было не хуже 2\AA .

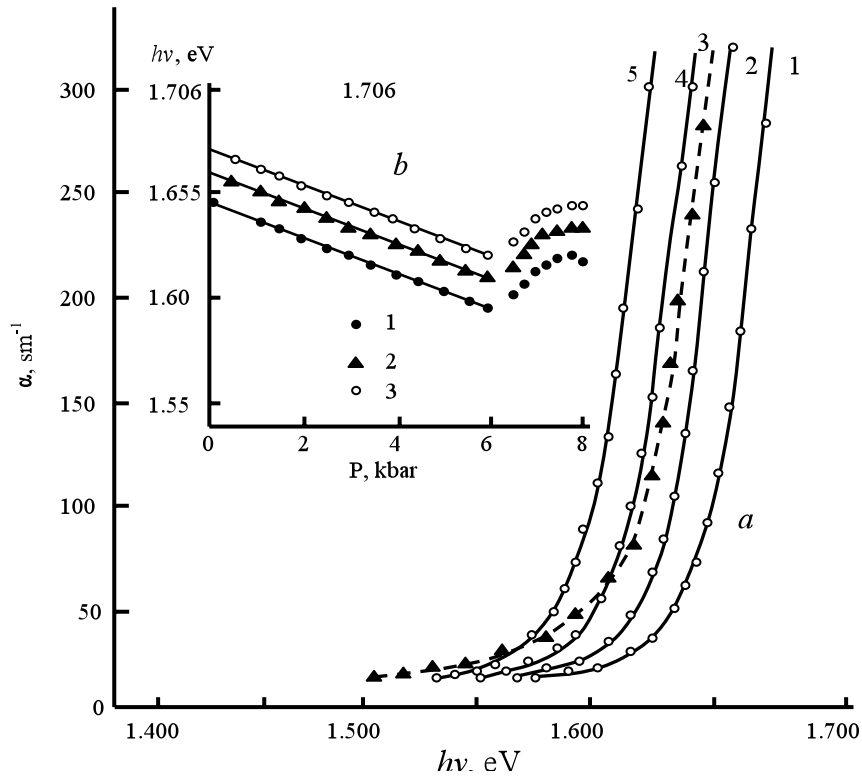


Рис.1 Спектры краевого поглощения монокристаллов $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ при различных давлениях (а); зависимости $(h\nu)_{\alpha=\text{const}} = f(P)$ при различных коэффициентах поглощения (б).
 а) P , кбар: 1 – 0.001, 2 – 1.97, 3 – 8.03, 4 – 3.92, 5 – 5.97;
 б) α , см^{-1} 1 – 100, 2 – 200, 3 – 300.

На рис. 1а представлены спектры поглощения $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ при гидростатическом давлении (P) до 8 кбар. Для анализа поведения края фундаментального по-

глощения с давлением полученные спектры были построены в виде

$$(h\nu)_{\alpha=const} = f(P), \quad (1)$$

где $h\nu$ - энергия падающего света, α - коэффициент поглощения. Как видно из рис.1 б, в диапазоне 6.0-6.5 кбар нарушается монотонный характер этих зависимостей, что свидетельствует о наличии фазового превращения. Барический коэффициент ширины запрещенной зоны $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$, определенный для фазы низкого давления из зависимостей (1), составляет $dE_g / dP = -(8.6 \pm 0.2) \cdot 10^{-3}$ эВ/бар.

Такое отрицательное и большое по абсолютной величине значение барического коэффициента ширины запрещенной зоны характерно слоистым соединениям. Это обусловлено тем, что вершина валентной зоны проводимости происходят из уровней, расщепленных межслойным взаимодействием, которое из-за слабой связи между слоями сильно меняется под давлением.

Наличие фазового превращения подтверждено результатами предварительных исследований дифференциально-термических исследований, в результате которых показано, что в исследованном интервале давлений в $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ действительно имеет фазовое превращение, которое сопровождается заметным тепловым эффектом.

Полученные экспериментальные данные могут быть объяснены на основе модели деформационного потенциала, предложенной для слоистых кристаллов [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Тагиров В.И., Гасанова Л.Г., Магомедов А.З. Электрические свойства нового тройного полупроводникового соединения $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$. // Неравновесные процессы в твердотельных и газовых плазмах. – Баку, -1983, -С.95-96.
2. Тагиров В.И., Гасанова Л.Г., Кязым-заде А.Г., Магомедов А.З. Получение и исследование фотоэлектрических свойств нового тройного полупроводникового соединения $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$. //Всесоюзная конференция «Тройные полупроводники и их применение. –Кишинев. 1978. Т.1. -С.207-208.
3. Тагиров В.И., Гасанова Л.Г., Магомедов А.З. Оптические свойства монокристаллов $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$. // Электрические и оптические свойства вещества. –Баку. – 1984. –С.36-38.
4. Allakhverdiev. K.R., Mammadov. T.G., Suleymanov. R.A., Gasanov. N.Z. Anomalies of optical properties and pressure induced phase transitions in layered crystals TlInS_2 , TlGaSe_2 and TlGaS_2 . J. Phys.: Condens. Matter 15, 2003 –p. 1291.

$\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ MONOKRİSTALININ OPTİK XASSƏLƏRİNDƏ ANOMALİYA

L.Q.HƏSƏNOVA, A.Z.MƏNHƏMMƏDOV

XÜLASƏ

Işdə $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ monokristalının udma sərhadinə hidrostatik təzyiqin təsiri öyrənilmişdir. Tədqiq olunan kristalın qadağan olunmuş zolağının eninin barik əmsalı təyin edilmişdir. Təzyiqin təsiri ilə optik spektrlərdə müşahidə olunan xüsusiyyətlər tədqiq olunan təzyiq və temperaturalarda faza keçidlərinin baş verdiyini göstərir.

**THE ANOMALY OF OPTICAL PROPERTIES
IN $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ SINGLE CRYSTALS**

L.Q.HASANOVA, A.Z.MAHAMMADOV

SUMMARY

In the paper the influence of pressure on the fundamental absorption edge of $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{S}_9$ singlecrystals was studied. The pressure coefficients of the forbidden bandgap was defined.

The changes at optics spectrums under influence of pressure shows that there is take place the phase transitions at investigated pressure and temperature.