



AM9900001

Препринт ЕФИ-1332(27)-91

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԶԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE



В. В. АРУТЮНЯН, В. А. ГЕВОРКЯН, Н. Е. ГРИГОРЯН

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ НА МЕЖЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В
МОНОКРИСТАЛЛАХ КОРУНДА

30 - 07

2

ЦНИИАтоминформ
ЕРЕВАН - 1991

DISCLAIMER

Portions of this document may be illegible in electronic image products. Images are produced from the best available original document.

Վ.Ա. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ն.Ե. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Վ.Վ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ,

**ՀԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ՀԱՓՑՈՒՂԻ ՄԻԱԲՑՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ
ՄԻՋՇԵՐՏԵՐԻ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ՎՐԱ**

Աշխատանքում թերված են էլեկտրոնային ճառագայթման ակդեցությունը շափյուղի միաբյուրեղների օպտիկական ֆունկցիաների (դիֆրեկտիկ հաստատունների) վրա հետազոտման արդյունքները: Չճառագայթված և ճառագայթված շափյուղի համար կառուցված են Արզանդի դիագրամները, որոնց օգնությամբ որոշվել են պարզիալ օսցիլյատորների ռեզոնանսային էներգիաները: Ցույց է տրված, որ ճառագայթման ներգործությունը բերում է շափյուղի բյուրեղների միջուկների տիրույթներում էլեկտրոնների վիճակների խտության փոփոխությանը՝ արատների քանակության ավելացման պատճառով:

Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ

Երևան 1991



Центральный научно-исследовательский институт информации и технико-экономических исследований по атомной науке и технике (ЦНИИАтоминформ) 1991 г.

Широкозонные монокристаллы корунда α - модификации (α - Al_2O_3) являются очень перспективными материалами для использования в оптоэлектронике. В связи с этим особый интерес представляют исследования электронной энергетической структуры (ЭЭС) и оптические характеристики (ОХ) кристаллов корунда в области фундаментального поглощения.

В настоящее время имеется ряд работ, посвященных изучению ЭЭС и ОХ в номинально чистом α - Al_2O_3 [1-5] и с помощью синхротронного излучения (СИ) [6,7]. Исследовано также влияние примесей, собственных и радиационных дефектов на оптические константы и межзонные переходы.

В работе [6] нами изучено влияние электронного облучения на структуру спектров оптических функций корунда в области фундаментального поглощения.

Целью настоящей работы является изучение влияния радиационных дефектов на параметры энергетических зон межзонных переходов в α - Al_2O_3 .

Одним из главных источников информации о параметрах межзонных интервалов энергии является исследование спектров оптичес-

кого поглощения и отражения света.

Изготовление образцов и измерения спектров отражения выполнены методами, описанными в [6]. Из спектров отражения рассчитывали оптические константы с использованием дисперсионного соотношения Крамерса-Кронига [8]. Для нахождения межзонных энергетических интервалов рассчитаны действительные и мнимые части диэлектрической проницаемости: $\epsilon_1(E) = n^2 - \kappa^2$; $\epsilon_2(E) = 2\kappa$.

Из рис. 1 и 2 видно, что в спектрах ϵ_1 и ϵ_2 в области 9,5-21 эВ четко выявляется группа полос, причем значение компоненты $\epsilon_2 = 0$ до энергии 8,2 эВ. Из полученных спектров видно также влияние радиации на величины компонент диэлектрической проницаемости. В спектре $\epsilon_1(E)$ (рис. 1, 2, кривая 1) пересекает ось абсцисс в спектральном интервале в области 20-24 эВ, а в облученном спектре этого не наблюдается. Максимумы $\epsilon_2(E)$ соответствуют энергиям межзонных переходов между электронными состояниями, а в инфракрасной области - и межколебательными состояниями решетки, связанными с поляризационными оптическими XO и TO фононами. В связи с этими представлениями величина $\epsilon_2(E)$ должна сильно зависеть как от ориентации \vec{E} $||$ C_3 к оптической оси C_3 , так и от электронного воздействия.

Действительно, в случае $\vec{E} \perp C_3$, $\epsilon_2(E)$ принимает минимальное значение (рис. 1, кривая 4). Из спектров $\epsilon_2(E)$ видно, что когда $\vec{E} \parallel C_3$, наибольшая плотность межзонных состояний реализуется при энергии ~ 14 эВ, а при $\vec{E} \perp C_3 \sim 17,5$ эВ. После электронного облучения наибольшая плотность достигается для энергий 13 и 19 эВ соответственно.

Однако для нахождения точного значения энергий межзонных переходов и учета всех осцилляторов использовался метод диаграмм

Арганда [9]. По кривым, построенным в координатной плоскости $\epsilon_2 - \epsilon_1$, проводилось разбиение сложного спектра на отдельные составляющие. Хорошо прорабатывающиеся, т.е. не перекрывающиеся контуры отдельных резонансов соответствовали на диаграммах линиям, которые по форме были близки к полуокружности (рис.3,4). Идеализированному единичному лоренцевскому осциллятору на плоскости $\epsilon_2 - \epsilon_1$ соответствует окружность.

Были построены диаграммы Арганда для монокристаллов облученного и необлученного корунда при разных ориентациях \vec{E} СИ к C_3 .

Для нахождения резонансных энергий экстраполировали каждую полуокружность, и по максимуму $\epsilon_2(E)$ находили значение O_i .

Расчет энергетических зон Бриллюэна (ЗБ) для Al_2O_3 , приведен в [10,11], где показано, что ЗБ образованы $1s$ -, $2s$ -, $2p$ - орбиталями алюминия Al^{3+} и кислорода O^{2-} , а также пятнадцатью плоскими волнами. Верхняя валентная зона образована $2p$ - орбиталями анионов O^{2-} и имеет максимальную ширину в 16,5 эВ. Ниже этой зоны на расстоянии, составляющем в Γ точке 7 эВ, расположена зона кислорода, также имеющая большую ширину (19,5 эВ). Из-за сложности базиса и низкой симметрии решетки все зоны очень сложны и образуются из наборов расщепившихся подзон.

Построенная вышеописанным образом диаграмма Арганда дала возможность более точно определить резонансные энергии парциальных осцилляторов. Для двух поляризаций ($\vec{E} \perp C_3$ и $\vec{E} \parallel C_3$) с учетом II-13 проведена следующая идентификация межзонных переходов в необлученном и облученном $\alpha-Al_2O_3$:

$$O_1^{\perp} - O_1'' - (9.5 - 9.0) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_{10\delta\lambda}^{\perp} - O_{10\delta\lambda}'' - (9.3 - 9.2) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_2^{\perp} - O_2'' - (11.6 - 11.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_{2\delta\lambda}^{\perp} - O_{2\delta\lambda}'' - (11.6 - 11.2) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_3^{\perp} - O_3'' - (12.8 - 13.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_{3\delta\lambda}^{\perp} - O_{3\delta\lambda}'' - (13.8 - 12.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_4^{\perp} - O_4'' - (13.5 - 14.0) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_{4\delta\lambda}^{\perp} - O_{4\delta\lambda}'' - (13.5 - 13.4) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_5^{\perp} - O_5'' - (13.5 - 14.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_{5\delta\lambda}^{\perp} - O_{5\delta\lambda}'' - (14.2 - 13.8) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-})$$

$$O_6^{\perp} - O_6'' - (13.8 - 16.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-}) - 3s(A\ell^{3+})$$

$$O_{6\delta\lambda}^{\perp} - O_{6\delta\lambda}'' - (17.2 - 16.5) \text{эВ} \rightarrow 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$O_7^{\perp} - O_7'' - (15.0 - 17.5) \text{эВ} \rightarrow 2p(O^{2-}) - 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$O_{7\delta\lambda}^{\perp} - O_{7\delta\lambda}'' - (18.5 - 18.0) \text{эВ} \rightarrow 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$O_8^{\perp} - O_8'' - (19.5 - 19.0) \text{эВ} \rightarrow 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$O_{8\delta\lambda}^{\perp} - O_{8\delta\lambda}'' - (17.0 - 19.2) \text{эВ} \rightarrow 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$O_9^{\perp} - O_9'' - (18.5 - 20.5) \text{эВ} \rightarrow 3s(A\ell^{3+}) - 2s(O^{2-}) - 3p^2(Q\ell^{3+}) - 2s(O^{2-})$$

$$\begin{aligned}
O_{9обл}^{\perp} - O_{9обл}'' &= 20.5 \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{10}^{\perp} - O_{10}'' &= (20.5-22.0) \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{10обл}^{\perp} - O_{10обл}'' &= (21.5-23.5) \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{11}^{\perp} - O_{11}'' &= 21.5 \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{11обл}^{\perp} - O_{11обл}'' &= 23.2 \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{12}^{\perp} &= 23.5 \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-}) \\
O_{12обл}^{\perp} &= 23.7 \text{ эВ} & \rightarrow & sp^2(Al^{3+}) - 2s(O^{2-})
\end{aligned}$$

Сопоставление спектрального положения полос оптических функций, приведенных нами в [8]: функции комбинированной межзонной плотности состояний $\epsilon_2 E^2$, функции энергетических потерь и эффективного числа валентных электронов (14 электронов), принимающих участие в межзонных переходах с зонной структурой $Al_2O_3^-$ подтверждает правильность сделанной идентификации, а именно, что максимумы полос обусловлены атомными орбиталями $3s$ - алюминия и $2s - 2p$ - кислорода и гибридными орбиталями - sp^2 .

Таким образом, идентификация межзонных переходов, ответственных за оптические свойства монокристалла корунда до энергии 24 эВ, показала, что радиационное воздействие приводит к изменению плотности состояний электронов в межзонных интервалах из-за увеличения концентрации дефектов.

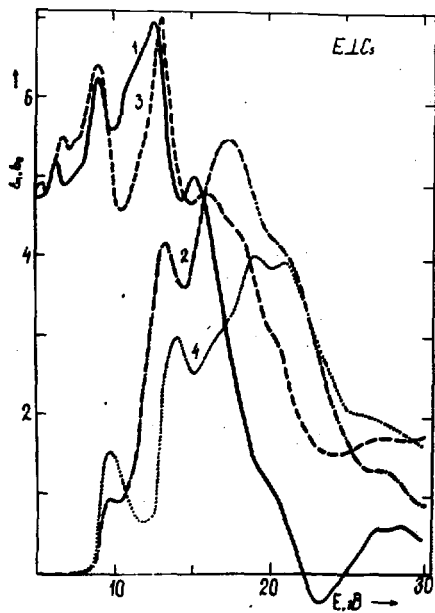


Рис. 1

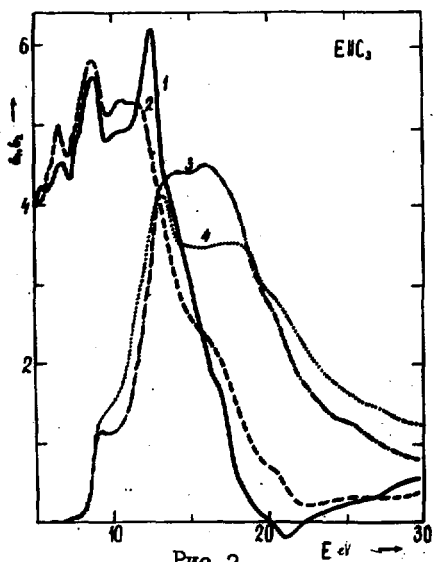


Рис. 2

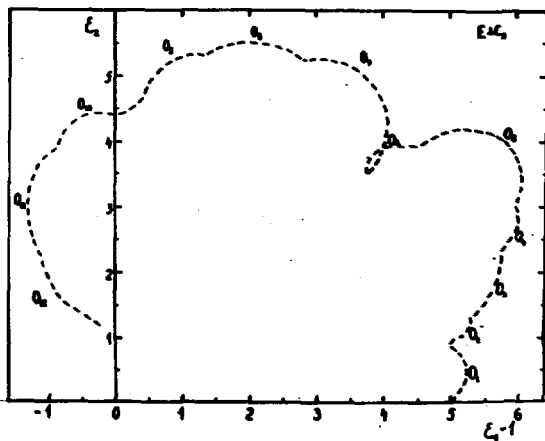


Рис. 3а

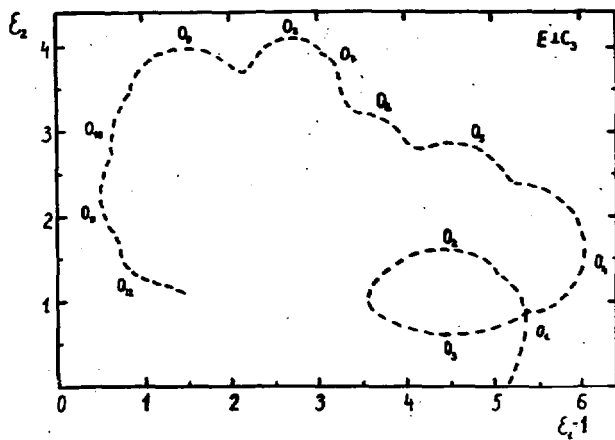


Рис. 3б

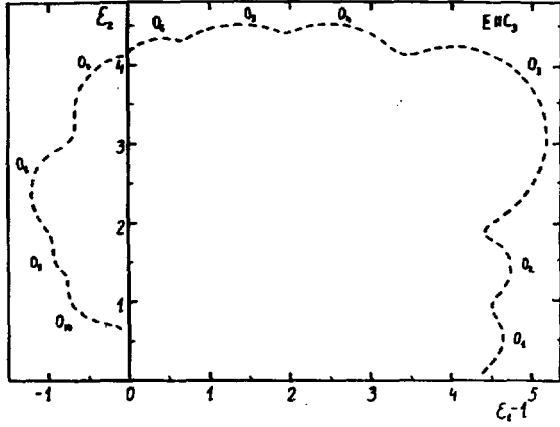


Рис. 4а

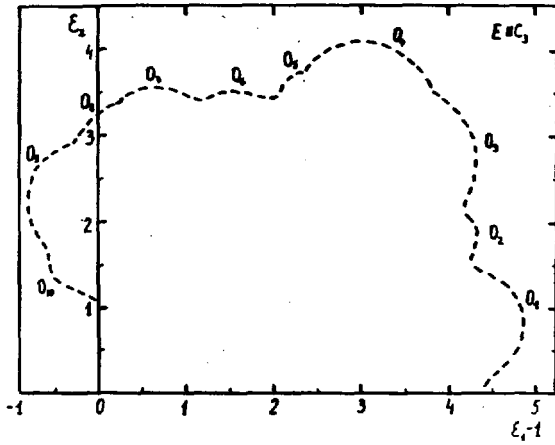


Рис. 4б

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис.1 Диэлектрические константы корунда ($\vec{E} \perp C_3$) :

1 (ϵ_1); 2 (ϵ_2) - необлученный;

3 (ϵ_1); 4 (ϵ_2) - облученный дозой $6 \cdot 10^{17}$ эл/см².

Рис.2 Диэлектрические константы корунда ($\vec{E} \parallel C_3$) :

1 (ϵ_1); 2 (ϵ_2) - необлученный;

3 (ϵ_1); 4 (ϵ_2) - облученный дозой $6 \cdot 10^{17}$ эл/см².

Рис.3 Диаграммы Арганда для монокристаллов корунда ($\vec{E} \perp C_3$) :

а) - необлученный;

б) - облученный.

Рис.4 Диаграммы Арганда для монокристаллов корунда ($\vec{E} \parallel C_3$):

а) - необлученный;

б) - облученный.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ильмас Э.Р., Кузнецов А.И. Фотопроводимость Al_2O_3 в области края собственного поглощения. ФТТ, 1972, т.14, в.5, с.1464-1468.
2. Кузнецов А.И., Ильмас Э.Р. Отражение кристаллов Al_2O_3 от граней (1011) и (0001) в области 4,5-14,5 эВ. ФТТ, 1975, т.17 в.7, с.2132-2133.
3. Ditchfield R.W. J. State Commun., 1976, V.19, pp.443-444.
4. Balzarotti A., Bianconi A. Nuov.Stat.Sol. (b), 1976, pp. pp. 689-694.
5. Ильмас Э.Р., Кузнецов А.И., Мерцло И.А. О поглощении лейкосапфира в УФ и вакуумной областях спектра. ЖПС, 1976, т.24, с.643-648.
6. Арутюнян В.В., Геворкян В.А., Григорян Н.Е., Ерицян Г.Н. Влияние электронного облучения на зонную структуру монокристалла $\alpha-Al_2O_3$. Препринт ЕФИ-11863(60)-89, Ереван, 1989, с.20.
7. Арутюнян В.В. Исследование радиационно-оптических свойств корунда с применением синхротронного излучения. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, Ереван, 1990, с.18.
8. Мосс Т. Оптические свойства полупроводников. Под. ред. С.И. Вавилова. М.: Мир, 1961, 350 с.
9. Witten T., Nogel S.R. Solid State Commun. 1975, V.16, N.2, pp.185-188.

10. Абрамов В.Н., Карин М.Г., Кузнецов А.И., Сидорин К.К. Электронная энергетическая структура и оптические свойства. ФТТ, 1979, т.21, вып.1, с.80-86.
11. Evarrestov R.A., Ermoshkin A.N, Lovchikov V.A. The energy band structure of corundum Phys.Stat.Sol. (b), 1980, V.99 N.1, pp.387-396.
12. Ciract S., Batra P., Electronic structure of γ -alumina and its defect states Phys.Rev.B., 1983, V.28, N.2, pp.982-992.
- 13 Batra P.I. Electronic structure of γ -alumina J.Phys.C: Solid State Phys., 1982, V.15, pp.5399-5410.

Рукопись поступила 2 мая 1991 г.

В.В. АРУТЮНЯН, В.А. ГЕВОРКЯН, Н.Е. ГРИГОРЯН

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ НА МЕЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ
КОРУНДА

Редактор Л.П. Мукаян

Технический редактор А.С. Абрамян

Подписано в печать 25/УП-91г.

Формат 60x84/16

Офсетная печать. Уч. изд. л. 0,5

Тираж 299 экз. Ц. 8 к.

Зак. тип. № 119

Индекс 3649

Отпечатано в Ереванском физическом институте

Ереван 36, ул. Братьев Аликханян, 2

**The address for requests:
Information Department
Yerevan Physics Institute
Alikhanian Brothers 2,
Yerevan, 375036
Armenia, USSR**

ИНДЕКС 3649



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ