

05;07

## Спектр предвзрывной люминесценции азидов таллия

© Б.П. Адуев, Э.Д. Алукер, А.Г. Кречетов, А.Ю. Митрофанов,  
А.Б. Гордиенко, А.С. Поплавной

Кемеровский государственный университет

Поступило в Редакцию 29 августа 1998 г.

С помощью методики "спектр за импульс" измерен разрешенный во времени спектр предвзрывной люминесценции азидов таллия. Отмечается хорошее согласие полученного спектра с результатами теоретического расчета плотности состояний в валентной зоне  $TlN_3$ .

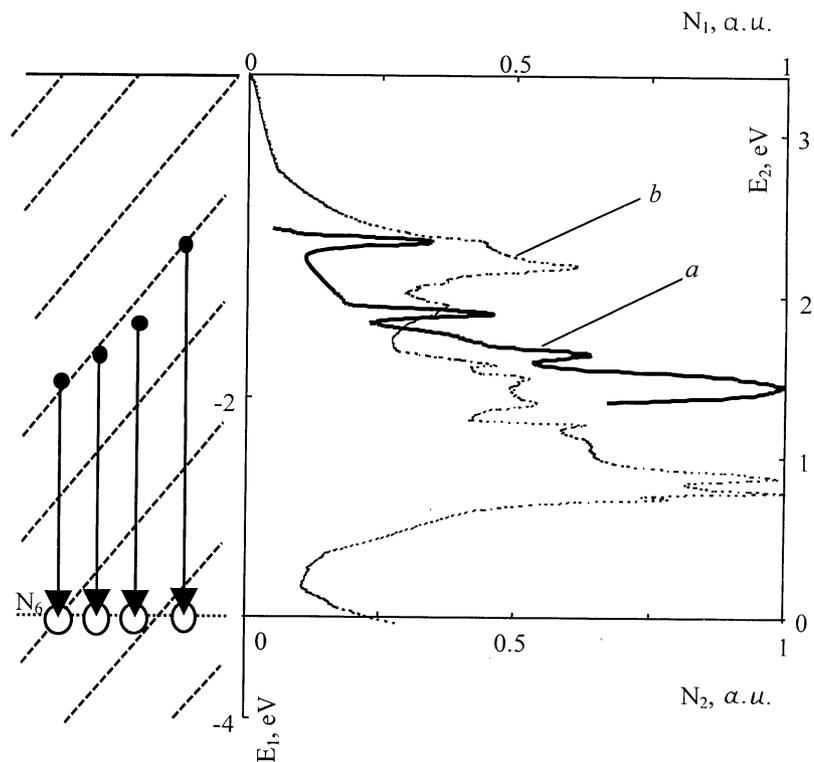
В [1,2] нами были измерены спектры предвзрывной люминесценции азидов серебра и свинца. Общим для этих материалов является наличие двух максимумов: первый для  $AgN_3$  на 2.25 eV, для  $PbN_6$  — на 2.1 eV и второй соответственно на 1.45 и 1.5 eV. Данная работа, являющаяся продолжением работ [1–3], посвящена измерению спектра предвзрывной люминесценции  $TlN_3$ .

Измерения проводились на установке [3], модифицированной для регистрации разрешенных во времени спектров люминесценции с единичного образца в интервале длин волн 500–1000 nm.

В качестве образцов для изучения использован азид таллия в виде таблеток  $300 \div 400 \mu m$  толщиной и 10 mm диаметром, полученных прессованием под давлением  $4 \cdot 10^4$  Pa из порошкообразного  $TlN_3$ , синтезированного методом двухструйной кристаллизации.

В отличие от  $AgN_3$  и  $PbN_6$  в спектре предвзрывной люминесценции азидов таллия обнаружены четыре максимума: на 2.35, 1.9, 1.65 и 1.4 eV.

В [4] нами предложена модель предвзрывной люминесценции азидов тяжелых металлов, согласно которой она вызывается оптическими переходами электронов валентной зоны на квазилокальный уровень, образующийся в глубине валентной зоны при развитии цепной реакции взрывного разложения. Экспериментальные результаты по спектру предвзрывной люминесценции азидов таллия  $N_2(E)$ , трактуемые с позиций



Сопоставление спектра предвзрывной люминесценции (*a*) с расчетной (*b*) плотностью состояний в валентной зоне:  $N_1$ ,  $E_1$  — шкала для плотности состояний ( $E_1 = 0$  — потолок валентной зоны);  $N_2$ ,  $E_2$  — шкала для спектра люминесценции;  $N_6$  — положение уровня квазилокального состояния, обеспечивающее наилучшую корреляцию спектра предвзрывной люминесценции с плотностью состояний. Вертикальные стрелки — оптические переходы электронов валентной зоны в квазилокальное состояние.

этой модели, сопоставлены на рисунке с новыми расчетами плотности состояний  $N_1(E)$  в валентной зоне.

Расчеты проводились самосогласованно в локальном приближении теории функционала плотности (ТФП), с использованием первоприн-

ципных, сохраняющих норму, сепарабельных псевдопотенциалов. Для построения ЛКАО представления одночастичных функций кристалла для всех типов атомов (Тl, N) использован базис их собственных псевдоатомных функций  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типа, радиальные части которых определялись из решения соответствующих "псевдоатомных" уравнений с последующим их аналитическим представлением [5,6]. Согласно вычисленной процедуре [7], при формировании секулярных уравнений учитывались плоские волны с энергиями до 33.6 Ry и общим числом до 2800. Для расчета  $N_1(E)$  с хорошим разрешением ( $\sim 0.01$  eV) спектр энергий  $E_n(\mathbf{k})$  вычислялся на достаточно густой  $\mathbf{k}$ -сетке, покрывающей зону Бриллюэна ( $\sim 10^4$  точек).

Из сопоставления экспериментальных и расчетных данных видно, что наилучшее согласие спектров предвзрывной люминесценции и плотности состояний в валентной зоне получается, если коротковолновый максимум спектра предвзрывной люминесценции  $N_2(E)$  приходится на "плечо" спектра  $N_1(E)$  в области  $\sim 2.2$  eV от вершины валентной зоны, что соответствует глубине залегания квазилокального уровня на  $\sim 3.4$  eV.

Нам представляется, что приведенные в данной статье результаты в совокупности с ранее опубликованными [1,2], могут рассматриваться как весомый довод в пользу адекватности предложенной в [4] модели предвзрывной люминесценции азидов тяжелых металлов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 98-03-32001) и гранта МО и ПО РФ.

## Список литературы

- [1] *Адуев Б.П., Алукер Э.Д., Кречетов А.Г.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 6. С. 24–27.
- [2] *Адуев Б.П., Алукер Э.Д., Захаров Ю.А., Кречетов А.Г., Чубукин И.В.* // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 66. В. 2. С. 101–103.
- [3] *Адуев Б.П., Алукер Э.Д., Кречетов А.Г., Сахарчук Ю.П.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 16. С. 31–34.
- [4] *Адуев Б.П., Алукер Э.Д., Белокуров Г.М., Кречетов А.Г.* // Химическая физика. 1997. Т. 16. № 8. С. 130–136.
- [5] *Гордиенко А.Б., Поплавной А.С.* // Изв. вузов. Физика. 1995. № 1. С. 54.
- [6] *Gordienko A.B., Poplavnoi A.S.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1997. V. 202. P. 941.
- [7] *Louie S., Ho K.-M., Cohen M.L.* // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 5747.