



Doctoral Thesis

## Exciton spectra of KCN and $K(\text{CN})_x\text{Cl}_{(1-x)}$ crystals

**Author(s):**

Rossinelli, Marco

**Publication Date:**

1979

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000161234> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss ETH 6372

EXCITON SPECTRA OF KCN  
AND  $K(CN)_xCl_{1-x}$  CRYSTALS

---

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY, ZURICH

for the degree of  
Doctor of Natural Sciences

presented by

M A R C O    R O S S I N E L L I

Dipl. Phys. ETH Zürich  
born October 17, 1950  
citizen of Cureglia TI

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. W. Känzig  
Prof. Dr. K. Dressler

1979

## Abstract

The reflectance spectra of KCN and  $\text{K}(\text{CN})_x\text{Cl}_{1-x}$  crystals have been measured in the energy range from 5 eV to 11.5 eV at temperatures between 5 K and 300 K. In KCN seven vibrational bands of the  $A^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+$  transition of the  $\text{CN}^-$  ion appear above 6.8 eV. Below 80 K a resolved Davydov splitting of the exciton bands is observed. The effects of exciton-phonon coupling and of the reorientational motion of the  $\text{CN}^-$  ions on the reflectance bands are discussed. Other optical transitions occurring at higher energies are interpreted on the basis of a simple electronic energy-level scheme. In  $\text{K}(\text{CN})_x\text{Cl}_{1-x}$  mixed crystals the Wannier excitons of chlorine and the vibronic excitons of  $\text{CN}^-$  are observed throughout the whole composition range. The concentration dependence of the  $A^1\Pi$  exciton progression is interpreted in terms of a point-dipole lattice model.

## Zusammenfassung

Die Reflexionsspektren von KCN und  $K(CN)_xCl_{1-x}$  Kristallen wurden im Bereich von 5 eV bis 11.5 eV und von 5 K bis 300 K gemessen. In KCN erscheinen oberhalb 6.8 eV sieben Vibrationsbanden des  $A^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+$  Uebergangs von  $CN^-$ . Unterhalb 80 K wird eine aufgelöste Davydov-Aufspaltung der Exzitonbanden beobachtet. Der Einfluss der Exziton-Phonon Kopplung und der Reorientierungsbewegung der  $CN^-$  Ionen auf die Reflexionsbanden wird diskutiert. Zur Interpretation der optischen Uebergänge, die bei höheren Energien auftreten, wird ein einfaches Energieniveauschema vorgeschlagen. In  $K(CN)_xCl_{1-x}$  Mischkristallen beobachtet man im ganzen Konzentrationsbereich die Wannier-Exzitonen des Chlors und die vibronischen Exzitonen des  $CN^-$ . Die Konzentrationsabhängigkeit der  $A^1\Pi$  Exziton-Progression wird aufgrund eines Punkt-Dipol Gittermodells interpretiert.