

УДК 621.315.392

© 1990

ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ СТАТИЧЕСКОГО ИСКАЖЕНИЯ И НЕЛИНЕЙНОСТИ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ГЛУБОКОГО ЦЕНТРА Cu_{Ga} В GaAs

Н. С. Аверкиев, А. А. Гуткин, Е. Б. Осипов,
В. Е. Седов, А. Ф. Цацульников

Проанализирована экспериментальная зависимость характеристического времени переориентации τ ян-теллеровского тетрагонального комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0\text{As}$ от деформации ϵ_1 при давлении P вдоль оси [100]. Показано, что при температуре 2 К и $\epsilon_1 < 10^{-3}$ переориентация происходит путем туннелирования под барьером, разделяющим состояния, которые соответствуют трем возможным ориентациям комплекса. Экспериментальная кривая $\tau = \tau(\epsilon_1)$ аппроксимирована расчетной в модели, рассматривающей туннелирование в адиабатических потенциалах, учитывающих линейное и квадратичное взаимодействия связанных дырок с E -колебаниями комплекса и обменное взаимодействие дырок. На основании результатов этой аппроксимации и данных других пьезооптических экспериментов определены параметры адиабатических потенциалов центра. Статическое смещение атомов As в комплексе $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0\text{As}$ из узлов решетки составляет $\sim 0.15 \text{ \AA}$, высота барьера между эквивалентными ориентациями при $P=0$ приблизительно равна 10 мэВ, энергия ян-теллеровской стабилизации лежит в диапазоне 10—16 мэВ.

Согласно результатам исследований [1-3], центр Cu в GaAs с уровнем, лежащим на 0.15 эВ выше ν -зоны, представляет собой нейтральный акцептор Cu_{Ga}^0 , который связывает две дырки, взаимодействующие с E -модой колебаний комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0\text{As}$. Благодаря этому взаимодействию комплекс обладает тетрагональной симметрией, т. е. искажен вдоль одной из осей $\langle 100 \rangle$ (эффект Яна—Теллера) и в каждый момент времени имеет определенную ориентацию. Недавние исследования [4] показали, что характеристическое время τ изменения этой ориентации при температуре 2 К сравнительно велико и составляет $\sim 10^{-4}$ с. Это указывает на существование барьера между эквивалентными конфигурациями центра, приводящего к статическому эффекту Яна—Теллера.

В рамках существующей модели центра Cu_{Ga}^0 [2] появление таких барьеров обусловлено нелинейностью взаимодействия связанных дырок с E -колебаниями. Ниже будет показано, что при гелиевых температурах переориентация комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0\text{As}$ осуществляется за счет туннельного эффекта. Поэтому ее вероятность сильно зависит от высоты и ширины потенциального барьера, которые в свою очередь определяются адиабатическими потенциалами (АП) центра и зависят от одноосной деформации, изменяющей эти потенциалы [2]. Указанные обстоятельства позволяют оценить параметры, определяющие АП центра Cu_{Ga}^0 из экспериментальной зависимости τ от деформации ϵ_1 [4], несмотря на сложности, связанные с необходимостью учета линейного и нелинейного электрон-фононного взаимодействия.

Для решения этой задачи в настоящей работе при различных величинах деформации кристалла вдоль оси [100] произведен численный расчет формы АП центра в пространстве обобщенных координат Q_2 и Q_3 , связанных с E -модой локальных колебаний, и оценена вероятность туннелиро-

вания из одного минимума АП в другой. Параметры центра определялись путем аппроксимации экспериментальной зависимости $\tau = \tau(\epsilon_1)$ [4] расчетной с учетом данных других экспериментов.

1. Форма адиабатических потенциалов и вероятность переориентации центра

Нижний лист АП ян-теллеровского центра Cu_{Ga}^0 в случае нагрузки вдоль осей [100] и [111] описывается выражением [2]

$$W_- = \frac{K\rho^2}{2} + \frac{3\Delta}{2} - \left[\frac{9\Delta^2}{4} + B'^2 \left(\frac{9}{4} \rho^2 + \frac{3B_T}{B'} \rho \epsilon_1 \cos \varphi - \frac{3\rho^3 B''}{B'} \cos 3\varphi + \frac{B_T^2}{B'^2} \epsilon_1^2 + \frac{B''^2}{B'^2} \rho^4 - \frac{2B_T B''}{B'^2} \epsilon_1 \rho^2 \cos 2\varphi \right) + 3D_T^2 \epsilon_3^2 \right]^{1/2}, \quad (1)$$

где $\rho = \sqrt{Q_2^2 + Q_3^2}$; $\varphi = \text{arctg}(Q_3/Q_2)$; K — коэффициент упругости для E -колебаний; B' , B'' — коэффициенты перед линейным и квадратичным членами полинома, описывающего взаимодействие связанных дырок с E -колебаниями комплекса; B_T , D_T — константы деформационного потенциала центра Cu_{Ga}^0 при одноосных нагрузках вдоль направления [100] и [111]; Δ — константа обменного взаимодействия связанных дырок; $\epsilon_1 = \epsilon_{xx} - (\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})/2$; $\epsilon_3 = \epsilon_{xy}$, где ϵ_{ik} — компоненты тензора деформации. Здесь и ниже предполагается, что $K > |2B''|$ и ось Q_2 проходит через один из минимумов АП, что соответствует $B'' < 0$, $B' > 0$. Кроме того, в (1) опущен член, описывающий общий сдвиг с деформацией всех ветвей АП в запрещенной зоне.

Энергия ян-теллеровской стабилизации $E_{\text{ЯТ}}$, т. е. разница между энергиями в точке $Q_2, Q_3=0$ и в минимуме АП, в случае, если $\Delta=0$, равна

$$E_{\text{ЯТ}}^0 = \frac{9}{8} \frac{B'^2}{K - |2B''|}. \quad (2)$$

Из (2) видно, что величина $K - |2B''|$ может рассматриваться как эффективный коэффициент упругости.

При условии, что величина $E_{\text{ЯТ}}$ заметно превосходит энергию нулевых колебаний центра E_0 и $E_{\text{ЯТ}} \gg \Delta$, E_0 связана с параметрами центра следующим соотношением:

$$E_0 \approx \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{K - |2B''|}{M}} \left(1 + \sqrt{\frac{|9B''|}{K - |B''|}} \right), \quad (3)$$

где M — масса атомов, участвующих в колебаниях. При этом статическое искажение комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 4\text{As}$ определяется радиусом ρ_0 , соответствующим положению минимума АП. Величина ρ_0 при нулевой нагрузке может быть найдена из уравнения

$$K \left[\frac{9}{4} \Delta^2 + B'^2 \rho_0^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{B''\rho_0}{B'} \right)^2 \right]^{1/2} = B'^2 \left(\frac{3}{2} - 2 \frac{B''\rho_0}{B'} \right) \left(\frac{3}{2} - \frac{B''\rho_0}{B'} \right). \quad (4)$$

Отсутствие искажений (комплекс $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 4\text{As}$ имеет симметрию T_d соответствует $\rho_0=0$ и реализуется при $B''=0$).

Отметим, что, используя (1), мы ограничиваемся учетом линейного и квадратичного взаимодействий дырки с локальными колебаниями, поскольку это является простейшим приближением, которое приводит к существованию энергетических барьеров между эквивалентными конфигурациями центра. Поправки более высоких степеней по смещению атомов могут приводить к изменению формы барьеров, что не сильно сказывается на описываемых эксперимент значениях основных характеристик АП W_- (положение минимумов АП и эффективная высота барьера между ними).

Процесс переориентации центра, т. е. переход из одного минимума АП в другой, вообще говоря, может быть термоактивационным или туннельным. Расчеты показывают, что при $V_T = -3.1$ эВ [8] термоактивационный механизм в случае температуры 2 К приводит к значительно более резкому падению τ с увеличением ϵ_1 , чем наблюдается экспериментально. Поэтому можно считать, что переориентация связана с туннельными переходами. Частота этих переходов τ^{-1} в одномерном случае описывается выражением

$$\tau^{-1} = \nu_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_l \sqrt{[W_-(x) - W_-^*(\rho_0) - E_0]/M} dx \right\}, \quad (5)$$

где l — путь туннельного перехода; E_0 — энергия нулевых колебаний системы; $W_-^*(\rho_0)$ — энергия минимума АП для конфигурации, из которой

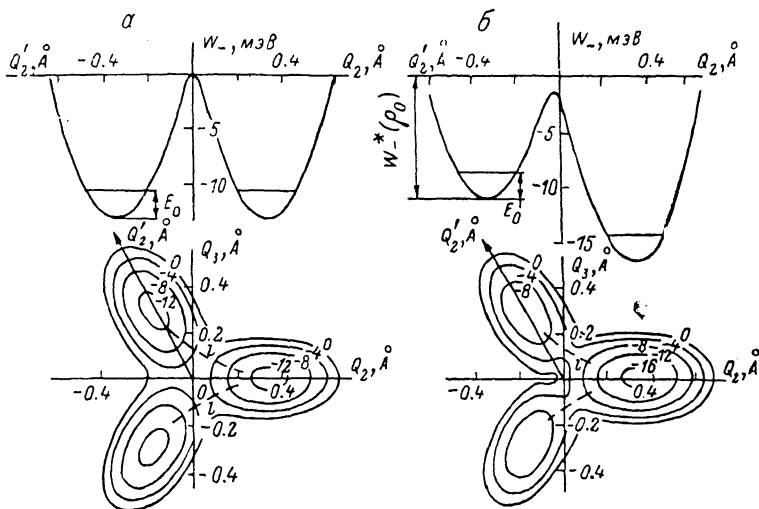


Рис. 1. Нижний лист адиабатического потенциала центра при $\epsilon_3 = 0$. $|\epsilon_1| = 0$ (а) и 1.2×10^{-3} (б).

Вверху — сечения поверхности $W_-(Q_2, Q_3)$ плоскостями, проходящими через ось W_- и минимумы АП; внизу — распределение эквипотенциальных линий в плоскости Q_2, Q_3 . Цифры в разрыве линий указывают величину АП в мэВ, линия l — оптимальный путь туннелирования. Расчет АП выполнен при $V_T = -3.1$ эВ и величинах параметров B' , B'' , K , приведенных в таблице для $E_{dT} = 16$ мэВ, $\Delta = 2$ мэВ.

происходит переход; ν_0 — частота соударений системы со стенкой потенциальной ямы. При $\epsilon_1 \neq 0$ выражение (5) справедливо для переходов из конфигурации с большей энергией.

В рассматриваемой нами ситуации движение системы происходит в плоскости Q_2, Q_3 и, следовательно, туннелирование может осуществляться вдоль различных путей l . Однако в силу экспоненциального характера (5) можно ограничиться путями, для которых интеграл в (5) минимален. Поскольку в АП, описываемых (1), как показывают расчеты, минимальная высота барьера находится в точке Q_2, Q_3 , близкой к кратчайшему пути туннелирования (рис. 1), именно близкие к этому пути траектории и определяют частоту переходов.

2. Процедура аппроксимации экспериментальной зависимости и результаты вычислений

При аппроксимации экспериментальной кривой $\tau = \tau(\epsilon_1)$ выражением (5) необходимые для вычисления $W_-(Q_2, Q_3)$ параметры K , B' и B'' подбирались, а величины ν_0 и M задавались. При этом интервал используемых значений ν_0 составлял $10^{10} - 10^{12}$ с $^{-1}$. Верхний предел этого интервала близок к частоте, соответствующей энергии нулевых колебаний системы

~ 3 мэВ, которая хорошо согласуется с полученными путем дальнейшей аппроксимации величинами параметров системы. Нижний предел интервала учитывает возможное уменьшение предэкспоненциального множителя в (5) по сравнению с частотой колебаний системы из-за двумерности этих колебаний. Изменение величины ν_0 в приведенном выше диапазоне слабо изменяет значения параметров K , B' и B'' , описывающих экспериментальную кривую $\tau = \tau(\epsilon_1)$.

Масса колеблющейся системы M в простейшем случае, принимающем во внимание ближайшее окружение CuGa , равна массе четырех атомов As. При этом все параметры, определяющие АП центра, имеют простой физический смысл, а величина ρ_0 описывает смещение равновесного положения четырех атомов As из узлов решетки [8].

Поскольку анализ результатов пьезоспектроскопических экспериментов позволяет оценить порядок $E_{\text{ЯТ}}^0$ и установить, что $\Delta \ll E_{\text{ЯТ}}^0$ [2], то при

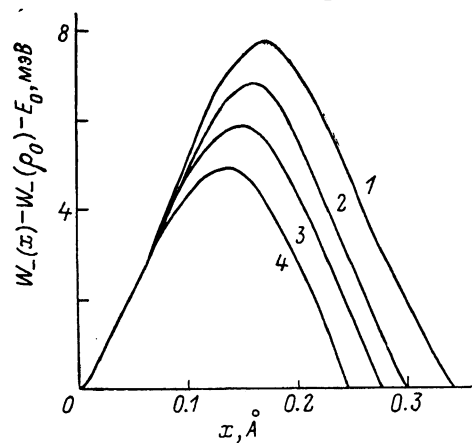


Рис. 2. Форма потенциального барьера для оптимального пути туннелирования при различных деформациях ϵ_1 .

$|\epsilon_1| \cdot 10^4$: 1 — 0, 2 — 3.2, 3 — 6.5, 4 — 9.7. Координата x отсчитывается вдоль траектории l на рис. 1. Величины параметров, описывающих АП, те же, что и для рис. 1.

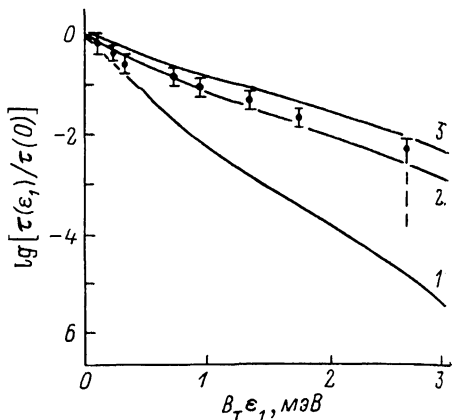


Рис. 3. Зависимость характеристического времени переориентации от величины внешней деформации.

Точки — эксперимент при 2 К; сплошные линии — расчет при $E_{\text{ЯТ}}^0 = 16$ мэВ, $\Delta = 2$ мэВ, $M = 5 \cdot 10^{-22}$ г. B' (10^6 эВ/см), B'' (10^{15} эВ/см 2), K (10^{15} эВ/см 2): 1 — 4.78, 0.2, 2.0; 2 — 6.31, 1.4, 11.2; 3 — 6.54, 20.0, 43.0.

аппроксимации экспериментальной зависимости $\tau = \tau(\epsilon_1)$ выражением (5) нами задавались величины $E_{\text{ЯТ}}^0$, Δ , B'' и K , а величины B' и E_0 вычислялись из (2), (3). Затем для различных значений деформации ϵ_1 определялись АП (выражение (1)), оптимальная траектория туннелирования и характеристическое время τ . Для получения наилучшего согласия расчета и эксперимента при заданных значениях $E_{\text{ЯТ}}^0$ и Δ варьировались величины B'' и K . Эта процедура повторялась для различных допустимых пар значений $E_{\text{ЯТ}}^0$ и Δ . На рис. 1 представлены типичные расчетные распределения энергии на нижнем листе АП W_- и оптимальные пути туннелирования для случаев нулевого давления и давления P вдоль оси [100], соответствующего $|\epsilon_1| = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Нелинейность ян-теллеровского взаимодействия ($B'' \neq 0$) вызывает появление трех минимумов АП и гофрировку поверхности $W = f(Q_2, Q_3)$ (рис. 1). При $P \parallel [100]$ увеличение P уменьшает высоту и ширину барьера для оптимального пути туннелирования системы из минимумов с большей энергией в абсолютный минимум (рис. 2). С этим и связана зависимость τ от ϵ_1 .

Как показали вычисления, основанные на указанной выше процедуре, в рассматриваемой системе невозможно получить согласие расчетной и экспериментальной зависимостей $\tau(\epsilon_1)$ при $E_{\text{ЯТ}}^0 \leq 10$ мэВ. При этом оказывается, что τ с ростом $|\epsilon_1|$ падает быстрее, чем наблюдалось экспериментально. Причиной подобного резкого падения τ является малая высота барьера для оптимального пути туннелирования (которая, как

очевидно, не может сильно превышать $E_{ЯТ} - E_0$) и следующая из этого обстоятельства большая длина этого пути, необходимая для обеспечения совпадения расчетной величины $\tau(\epsilon_1=0)$ с наблюдаемой.

Если $E_{ЯТ}^0 > 10$ мэВ, то согласие расчетной кривой $\tau = \tau(\epsilon_1)$ с экспериментальной, вообще говоря, может быть достигнуто при различных $E_{ЯТ}$. Пример такой аппроксимации показан на рис. 3. Некоторые наборы значений параметров, удовлетворяющих экспериментальной зависимости $\tau(\epsilon_1)$ при различных $E_{ЯТ}$ и Δ , приведены в таблице.

Отметим, что высота барьера для оптимального пути туннелирования и описываемая параметром ρ_0 величина статического искажения тетраэдрического комплекса при $E_{ЯТ}^0 = 12-30$ мэВ лежат в относительно узких интервалах. Причина этого заключается в том, что именно эти параметры определяют вероятность туннелирования и должны описывать экспериментальную кривую $\tau(\epsilon_1)$. Область допустимых значений $E_{ЯТ}$ может быть установлена из других пьезоспектроскопических экспериментов, как обсуждено в следующем разделе.

3. Сопоставление с данными других экспериментов.

Обсуждение

1. Используем параметры, приведенные в таблице, для вычисления константы деформационного потенциала центра $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 D_T$ из пьезоспектроскопических характеристик фотолюминесценции при $P \parallel [111]$ [7].

Согласно [7, 8], сужение линии фотолюминесценции ян-теллеровского центра и резкое изменение ее положения [7] при достаточно большой деформации вдоль оси [111] обусловлены эффективным устранением взаимодействия с E -колебаниями (подавлением эффекта Яна-Теллера). Это означает, что абсолютный минимум нижней ветви АП центра смещается в точку $(Q_2, Q_3) = 0$. Как показывает анализ выражения (1), величина давления P_0 , соответствующая началу резкого сужения полосы фотолюминесценции (окончанию «скачка» в положении ее пика), связана с параметрами центра соотношением

Параметры адиабатических потенциалов комплексов $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 4A_5$, удовлетворяющие экспериментальной зависимости $\tau = \tau(\epsilon_1)$ при $M = 4M_A$

$E_{ЯТ}^0$ мэВ	Δ , мэВ	$ B' $, 10^6 эВ/см	$ B'' $, 10^5 эВ/см ²	K , 10^{18} эВ/см ²	$E_{ЯТ}$, мэВ	ρ_0 , Å	E_0 , мэВ	V , мэВ	$ D_T $, эВ
12	0	4.4	1.6	5.0	12.0	0.37	2.3	9.4	6.9—8.6
16	0	6.4	2.0	6.9	16.0	0.33	2.8	11.7	9.1—11.4
	2	6.3	1.4	5.6	13.0	0.34	2.6	10.3	9.3—11.6
	4	5.8	2.6	7.5	10.3	0.37	2.7	10.3	8.9—11.1
20	0	8.8	2.8	10.0	20.0	0.30	3.3	14.3	11.4—14.4
	4	7.8	2.0	7.5	14.0	0.33	2.9	12.5	11.4—14.1
	6	7.4	1.7	6.5	11.6	0.35	2.7	10.8	11.0—13.7
30	0	13.4	1.14	9.0	30.0	0.30	3.1	12.2	20.2—25.3
	4	13.4	1.2	9.2	24.2	0.30	3.1	11.9	20.1—25.1
	8	13.4	1.3	9.3	19.0	0.30	3.2	11.8	19.3—24.1

$V = [W_-(x)]_{\text{max}} - W_-(\rho_0)$, где x отсчитывается вдоль оптимального пути туннелирования.

$$D_T = -C_{44} \frac{9\sqrt{3}}{2P_0} \frac{B'^2}{K} \eta^{3/2} \left(1 - \frac{4\Delta^2 K^2}{9B'^4 \eta^3}\right)^{1/2}, \quad (6)$$

где $\eta = (K^2 - B''^2)/(K^2 - 4B''^2)$, C_{44} — упругая постоянная GaAs. Оценки D_T на основании (6) с использованием экспериментального значения $P_0 = 4.5 \pm 0.5$ кбар [7, 8] приведены в таблице.

С другой стороны, в соответствии с представлениями, развитыми в работах [2, 5], можно ожидать, что константа деформационного потенциала D_T акцептора Cu_{Ga}^0 , связывающего две дырки, по абсолютной величине не превышает удвоенного значения соответствующей константы для ν -зоны $D_\nu = -5.4$ эВ [9]. Кроме того, для ряда акцепторов в GaAs отношение констант деформационного потенциала B_T и D_T в исходном состоянии, не искаженном внутрицентровыми взаимодействиями, примерно равно отношению соответствующих констант для ν -зоны. Эти соображения позволяют более точно оценить ожидаемую величину D_T для Cu_{Ga}^0 . Воспользовавшись значениями D_ν , B_ν [9] и B_T , определенным в [5] независимым

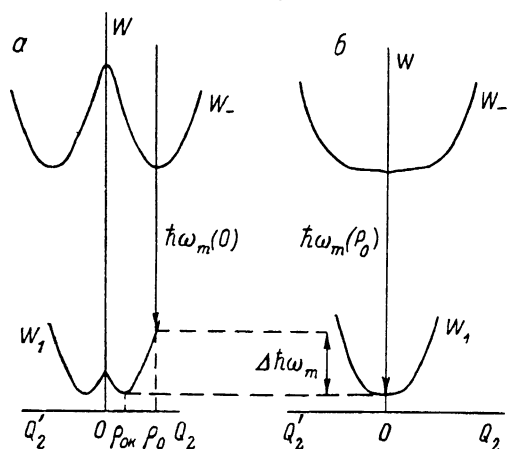


Рис. 4. Схематическое изображение АП и излучательных электронных переходов в случае давления вдоль оси [111], демонстрирующее возникновение скачка в спектральном положении полосы ФЛ. $P=0$ (а), $P=P_0$ (б).

На рисунке не показан относительный энергетический сдвиг с давлением АП начального и конечного состояний.

способом, можно получить, что величина D_T должна быть равна $-(7 \div 9)$ эВ. Сопоставление этого значения с результатами вычислений, приведенными в таблице, показывают, что наиболее вероятными значениями параметров Cu_{Ga}^0 являются величины, соответствующие $E_{\text{ЯТ}}^0 = 12 \div 16$ мэВ при $\Delta \leq 0.3 E_{\text{ЯТ}}^0$.

2. Рассмотрим теперь величину скачка в положении пика примесной фотолуминесценции при повышении давления вдоль оси [111] [7], связанного с подавлением эффекта Яна—Теллера.

Согласно качественному рассмотрению, проведенному в [7], эта величина $\Delta \hbar \omega_m$ приблизительно равна упругой энергии центра, захватившего один электрон (т. е. связывающего одну дырку), если его искажение равно статическому искажению центра до захвата электрона. В условиях заметной нелинейности ян-теллеровского взаимодействия связанных дырок с E -колебаниями эта энергия может заметно отличаться от $E_{\text{ЯТ}}$, так как эффективная упругость центра в конечном состоянии, связывающем одну дырку, отличается от эффективной упругости начального состояния (рис. 4).

Воспользуемся приближением, предполагающим, что исходные коэффициенты упругости K центра в начальном и конечном состояниях одинаковы, а константы взаимодействия с E -колебаниями в конечном состоянии b_k' и b_k'' отличаются от соответствующих констант в начальном состоянии B' и B'' в одно и то же число раз α . Если подавление эффекта Яна—Теллера в начальном и конечном состояниях происходит приблизительно при одной и той же величине деформации, то, используя приближенные соотношения между параметрами центра и радиусами, описывающими положения минимумов АП начального и конечного состояний в плоскости Q_2, Q_3 , получим из рис. 4

$$\frac{\Delta \hbar \omega_m}{E_{ЯТ}^0} \approx \frac{K - |2\alpha B''|}{K - |2B''|} \left[1 - \frac{\alpha(K - |2B''|)}{K - |2\alpha B''|} \right]^2. \quad (7)$$

Для экспериментальной величины $\Delta \hbar \omega_m \approx 10$ мэВ [?] и параметров центра, приведенных в таблице, выражение (7) дает $\alpha = 0.5 \div 0.7$. Смещение положения минимумов АП в конечном состоянии из точки Q_2 , $Q_3 = 0$ $\rho_{ок}$ при этом лежит в пределах $0.09 - 0.15$ Å. Полученное значение α согласуется с предположением, что различие констант взаимодействия с E -модой колебаний в начальном и конечном состояниях обусловлено главным образом уменьшением числа связанных на центре дырок. Оценки параметров АП конечного состояния с использованием найденной величины α показывают, что статический эффект Яна—Теллера в этом состоянии отсутствует. Это согласуется с данными работы [10] и предположением о разориентации центра после захвата электрона в случае слабых давлений вдоль оси [100], сделанным для CuGa при интерпретации результатов измерений в работе [4].

Из приведенного выше следует, что величина скачка в положении линии фотолюминесценции CuGa при $P \parallel [111]$ может быть объяснена непротиворечивым образом в рамках рассматриваемой модели.

3. Обсудим изменение ширины линии фотолюминесценции с температурой T . Хотя рассматриваемые нами колебания атомов примесного комплекса $\text{CuGa}4\text{As}$ описываются двумя обобщенными координатами, при не слишком высоких температурах, не делая больших ошибок, для оценки эффективных коэффициентов упругости можно воспользоваться простой моделью одномерных гармонических колебаний вдоль обобщенной координаты Q_2 при сильном электрон-фононном взаимодействии. Причины этого состоят в следующем. Во-первых, положения минимумов АП центра в начальном CuGa^0 и конечном CuGa состояниях в рассматриваемой нами модели смещены относительно друг друга только вдоль оси Q_2 . В силу этого ширина линии излучения при $T \rightarrow 0$ определяется в основном изменением АП вдоль этой оси. Во-вторых, направлению оси Q_2 соответствует наименьший эффективный коэффициент упругости системы, в силу чего при низких T возбуждаются в основном колебания вдоль этой оси.

Выражения, связывающие эффективные коэффициенты упругости в начальном K_e и конечном K_f состояниях с шириной линии излучения для линейного гармонического осциллятора в случае сильной релаксации примесного комплекса при электронном переходе, имеют вид [11]

$$K_e = M \left(\frac{2k}{\hbar} \right) \left[\frac{\delta_{1/2}(0)}{\beta} \right]^4, \quad K_f = \sqrt{\frac{K_e}{2k \ln 2}} \frac{\beta}{r_0}, \quad (8), (9)$$

где k — постоянная Больцмана; r_0 — расстояние между положением минимумов АП в начальном и конечном состояниях ($r_0 = \rho_0 - \rho_{ок}$); $\delta_{1/2}(0)$ — половина ширины линии излучения на уровне 1/2 от максимальной интенсивности в пределе низких температур; β — тангенс угла наклона зависимости $\delta_{1/2}(\sqrt{T})$ в пределе высоких температур.

На рис. 5 приведена экспериментальная температурная зависимость коротковолновой части полуширины полосы фотолюминесценции, сопровождающей излучательный захват электрона центром CuGa^0 , $\delta_{1/2}(\sqrt{T})$. Эта часть в низкотемпературной области не испытывает влияния наложения фононных повторений, связанных с оптическим фононом, имеющим энергию 36 мэВ. Согласно рассмотренным выше представлениям о колебаниях системы и теории для линейного осциллятора [11], для оценки β может быть использована величина тангенса угла наклона прямой, проходящей через начало координат и касающейся экспериментальной зависимости $\delta_{1/2}(\sqrt{T})$ (рис. 5) (отклонения экспериментальных точек при высоких температурах от этой касательной связано с возбуждением локальных колебаний с более высокой энергией фононов).

Использование в (8), (9) экспериментальных значений $\delta_{1/2}(0)$ и β и вычисленных величин ρ_0 и $\rho_{ок}$ дает $K_e \approx 4.8 \cdot 10^{15}$, $K_f = (3.8 \div 4.7) \times$

$\times 10^{15}$ эВ/см² для $E_{\text{ЯТ}}^0 = 12 \div 16$ мэВ. Учитывая отмеченные выше приближения, можно заключить, что полученные значения достаточно хорошо согласуются с величинами эффективных коэффициентов упругости для начального $K - |2B''|$ и конечного $K - |2\alpha B''|$ состояний центра (см. таблицу).

4. Отметим также, что в рассматриваемой нами модели АП уменьшение при возрастании ϵ_1 степени разориентации центров Cu_{Ga}^0 после рекомбинации через них электронно-дырочных пар и быстрой релаксации в один из минимумов АП W_- (т. е. наблюдавшееся в [4] увеличение введенного в [4] параметра A) может определяться двумя механизмами. Во-первых, изменение АП в состояниях Cu_{Ga}^0 и Cu_{Ga}^- с деформацией приводит к выстраиванию центров в состоянии Cu_{Ga}^- и увеличению вероятности попадания центра в абсолютный минимум АП Cu_{Ga}^0 непосредственно в результате процессов захвата дырки и быстрой релаксации, если этот захват происхо-

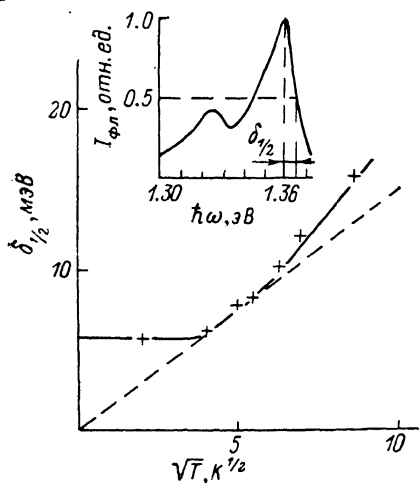


Рис. 5. Температурная зависимость коротковолновой части полуширины основного пика ФЛ.

На вставке — спектр ФЛ при температуре 2 К.

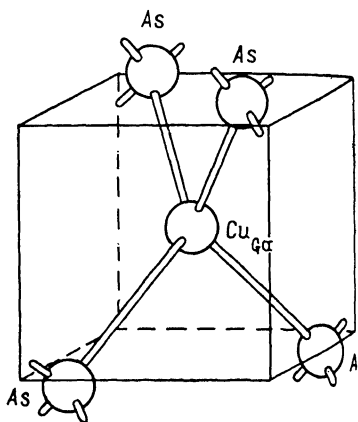


Рис. 6. Характер статического искажения центра $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 4\text{As}$.

дит излучательно. Во-вторых, уменьшение τ с ростом ϵ_1 при больших ϵ_1 может стать более быстрым, чем в рассмотренной нами простейшей модели туннельных переходов. Одной из причин такого поведения может быть резкое увеличение вероятности термоактивационного преодоления барьера, вызванное его понижением при увеличении ϵ_1 . Сравнимость τ со временем быстрой релаксации системы внутри отдельного минимума АП означает, что введенный в [4] при феноменологическом описании процесса установления термического равновесия в центре Cu_{Ga} параметр A равен 1.

Как показывают оценки, использующие определенные выше параметры АП Cu_{Ga}^0 и Cu_{Ga}^- , первый механизм может вызвать медленное возрастание A при $\epsilon_1 = 0 \div 1 \cdot 10^{-3}$, а второй быть причиной быстрого увеличения A до 1 при $\epsilon_1 > 10^{-3}$. Такое поведение A и наблюдалось экспериментально [4].

4. Обсуждение результатов

Проведенный выше анализ показывает, что при температурах ~ 2 К переориентация комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}^0 4\text{As}$ в GaAs происходит за счет туннельного эффекта. Высота барьера, разделяющего три эквивалентные ориентации комплекса, соответствующие трем возможным направлениям оси $\langle 100 \rangle$ в кристалле, при $P=0$ составляет ~ 10 мэВ, а ширина барьера в пространстве обобщенных координат Q_2, Q_3 равна нескольким десяткам ангстрема. Величины параметров центра, удовлетворяющие экспериментальным данным, приведены в таблице (для $E_{\text{ЯТ}}^0 = 12 \div 16$ мэВ). При этом

величина статического искажения комплекса в пространстве обобщенных координат приблизительно равна 0.30—0.37 Å. Согласно выбору обобщенных координат [6], это означает, что ближайшие к Cu_{Ga} атомы As сдвинуты из узлов решетки на ~ 0.15 Å (рис. 6). Такая величина представляется разумной и наблюдалась для других ян-теллеровских центров в кубических кристаллах [12].

Строго говоря, рассматривая исследуемый центр Cu_{Ga} как комплекс $\text{Cu}_{\text{Ga}}4\text{As}$, мы пренебрегаем влиянием смещения атомов решетки, находящихся за пределами первой координационной сферы. Эффективный учет этого влияния может увеличить массу туннелирующей системы по сравнению с принятой при расчете ($4M_{\text{As}}$) и соответственно изменить определяемые аппроксимацией экспериментальных данных параметры АП центра. Однако смещение атомов кристалла сильно падает с увеличением расстояния от точечного источника деформации.¹ В частности, в случае центра As в Si смещение атомов Si, ближайших к деформированному примесному комплексу, не превышало 10 % от смещения атомов самого комплекса [14]. Подобное соотношение смещений предполагалось и для А-центра в Si [15]. Относительная малость смещений атомов решетки вне комплекса примесь + +ближайшее окружение приводит к тому, что эффективная масса туннелирующей системы незначительно превышает массу сдвигающихся атомов комплекса.

Для определения возможного изменения параметров АП, связанного с увеличением массы туннелирующей системы, мы провели аппроксимацию экспериментальной зависимости $\tau = \tau(\epsilon_1)$ при $M = 8M_{\text{As}}$ (эта величина превосходит возможное увеличение M , оцениваемое с использованием приведенных выше величин смещений). Полученные таким образом значения параметров по-прежнему согласовались с данными других измерений и оценок. Величина ρ_0 уменьшалась в ~ 1.5 раза по сравнению с приведенной в таблице. Высота барьера для туннелирования оставалась ~ 10 мэВ.

Сказанное позволяет заключить, что феноменологическая модель изолированного комплекса $\text{Cu}_{\text{Ga}}4\text{As}$ тетрагональной симметрии удовлетворительно объясняет динамические характеристики центра Cu_{Ga} в GaAs и их поведение при одноосном давлении. Значения параметров этой модели в простейшем случае, учитывающем только линейное и квадратичное взаимодействия связанных на центре дырок с квазилокальными E -колебаниями, найденные из рассмотрения экспериментальных данных о скорости переориентации комплекса, находятся в разумном согласии с величинами, ожидаемыми из зависимости фотолюминесценции центра от давления и температуры. Это свидетельствует о близости рассчитанных АП центра к реальным. Отметим, что особенностью этих потенциалов является сравнимость величин энергии ян-теллеровской стабилизации с высотой потенциального барьера, разделяющего эквивалентные ориентации центра.

В заключение авторы выражают благодарность Д. И. Ковалеву и А. Ю. Бланку за измерения спектров фотолюминесценции при температурах 16—50 К.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Меркулов И. А. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1988. Т. 52. № 3. С. 482—485.
- [2] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Седов В. Е. // ФТП. 1987. Т. 21. № 3. С. 415—420.
- [3] Averkiev N. S., Gutkin A. A., Merkulov I. A., Osipov E. B., Sedov V. E. // Proc. XIX Int. Conf. on the Physics of Semicond. Warsaw, Poland, 1988; Inst. of Phys. Polish Acad. Sci. 1988. V. 2. P. 1075—1078.
- [4] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Седов В. Е., Цацульников А. Ф. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1459—1465.

¹ В изотропной среде на больших расстояниях r от источника деформации смещение пропорционально r^{-5} [13].

- [5] Аверкиев Н. С., Адамия Э. А., Аладашвили Д. И., Аширов Т. К., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Седов В. Е. // ФТП. 1987. Т. 21. № 3. С. 421—426.
- [6] Берсукер И. Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Введение в теорию. Л., 1986. 288 с.
- [7] Аверкиев Н. С., Аширов Т. К., Гуткин А. А. // ФТП. 1968. Т. 17. № 1. С. 97—102.
- [8] Аверкиев Н. С., Аширов Т. К., Гуткин А. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 7. С. 2046—2051.
- [9] Bhargava R. N., Nathan M. I. // Phys. Rev. 1967. V. 161. N 3. P. 695—698.
- [10] Аширов Т. К., Гуткин А. А. // ФТП. 1983. Т. 17. № 3. С. 418—421.
- [11] Klick C. C., Schulman J. H. // Sol. St. Phys. Advances in Res. and Appl. 1957. V. 5. P. 97—172.
- [12] Сочава Л. С., Толпаров Ю. Н., Ковалев Н. Н. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 1. С. 217—226.
- [13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1965. 202 с.
- [14] Erbil A., Weber W., Cargill G. S., Boehme R. F. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 2. P. 1392—1394.
- [15] Samara G. A. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 9. P. 4841—4848.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
10 марта 1990 г.