

06;08

## **Взаимодействие ультразвука с электронами в гибридизированных состояниях на примесях железа в кристалле селенида ртути**

© В.И. Окулов, В.В. Гудков, А.Т. Лончаков, И.В. Жевстовских,  
Т.Е. Говоркова, С.Ю. Паранчич

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург  
Российский государственный профессионально-педагогический  
университет, Екатеринбург  
Черновицкий национальный университет, Черновцы, Украина  
E-mail: okulov@impr.uran.ru

*В окончательной редакции 20 марта 2007 г.*

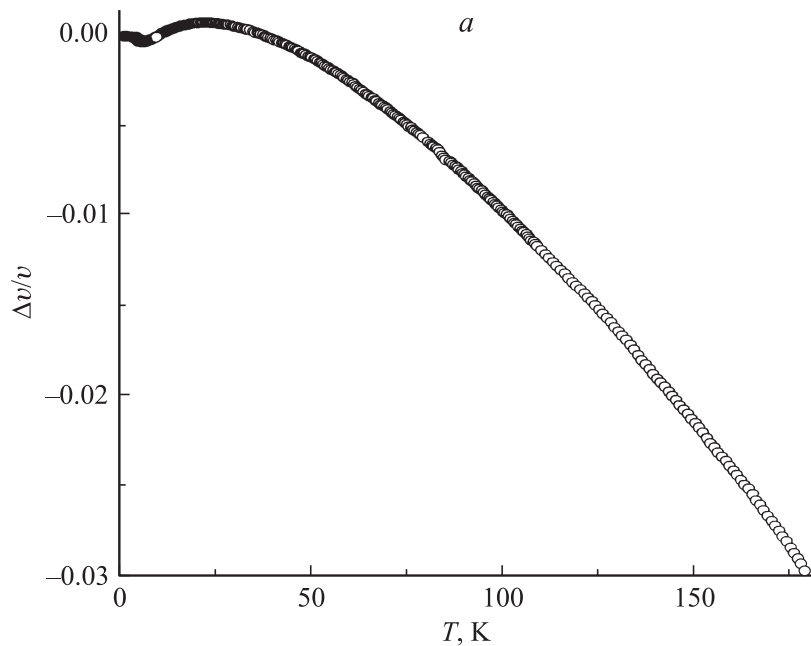
Исследовано распространение поперечных ультразвуковых волн частотой 52 МГц в кристаллах HgSe:Fe при концентрации примесей железа  $10^{19} \text{ см}^{-2}$ , для которой в проводимости максимально проявляются изучавшиеся ранее эффекты резонансного рассеяния электронов. Обнаружены аномалии температурных зависимостей коэффициента поглощения  $\alpha(T)$  и фазовой скорости  $v(T)$  поперечных волн в интервале  $T = 1.48 \div 80 \text{ К}$ . Для медленной поперечной волны кривая  $\alpha(T)$  имеет пик, а зависимость  $v(T)$  — минимум при температуре около 5 К. Наблюдаемые аномалии объяснены на основе теории взаимодействия ультразвука с электронами в гибридизированных состояниях на примесях железа.

PACS: 43.35.+d, 61.72.Vv, 62.20.Dc, 64.70.Kb

В настоящем сообщении приводятся данные наблюдений распространения ультразвука в кристаллах селенида ртути с примесями железа в условиях, когда в температурных зависимостях ультразвуковых параметров существенно проявляются эффекты гибридизации примесных электронных состояний в полосе проводимости. Электронные состояния на примесях переходных элементов в полупроводниковых кристаллах сравнительно хорошо исследованы для тех случаев, когда примесные энергетические уровни расположены в запрещенных полосах энергетического спектра кристалла. Однако для решения актуальных

в последнее время проблем образования и динамики локализованных примесных магнитных моментов необходимо изучение и таких состояний, которые возникают при попадании донорных примесных уровней в полосу проводимости. Для них характерно явление гибридизации, которому отвечает совместное существование свободного движения и локализации электронов на примесных центрах в узком интервале энергий вблизи энергии резонанса, в которую модифицируется энергия связанного состояния. Иными словами, электроны в гибридизированных состояниях испытывают резонансное рассеяние на ионах примеси. Если энергия Ферми электронов близка к резонансной энергии, то проводимость имеет аномалии концентрационной и температурной зависимости, которые интерпретировались на основе изложенных выше представлений в работах [1,2]. Эксперименты, выполнявшиеся на кристаллах селенида ртути с примесями железа, образующими донорный  $d$ -уровень в полосе проводимости, показали, что при концентрации примесей около  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  наблюдаются эффекты, обусловленные гибридизацией. Цель настоящей работы состояла в том, чтобы обнаружить такого рода эффекты в температурных зависимостях ультразвуковых параметров и развить их количественную интерпретацию. Предпосылкой возможности достижения этой цели стали выполненные недавно [3–5] ультразвуковые исследования кристаллов селенида цинка, легированных примесями переходных элементов малой концентрации, которые показали наличие обусловленных примесями аномалий (пик коэффициента поглощения и резкое изменение скорости звука) температурных зависимостей коэффициента поглощения и скорости поперечного звука в узких интервалах температур вблизи 10 К. В селениде цинка — широкозонном полупроводнике примесные электронные состояния гибридизируются с состояниями валентной полосы кристалла, и наблюдавшиеся акустические аномалии можно связать с проявлением этого типа гибридизации. Обнаружение близких по природе эффектов в кристаллах, кардинально отличающихся по проводящим свойствам, также представлялось интересной задачей.

Эксперимент был выполнен с использованием установки, работающей по принципу перестраиваемого по частоте моста [6]. Ультразвуковые волны генерировались и принимались пьезопреобразователями из ниобата лития с резонансной частотой  $\omega/2\pi \approx 52 \text{ MHz}$ . Монокристаллический образец селенида ртути с концентрацией примесей железа  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  имел форму цилиндра с длиной  $h = 4.8 \text{ mm}$ . Ось цилиндра была параллельна оси  $\langle 110 \rangle$  кристалла.



**Рис. 1.** Температурные зависимости фазовой скорости (*a*) и поглощения (*b*) медленной поперечной волны.  $\Delta v/v = [v(T) - v(1.48 \text{ K})]/v(1.48 \text{ K})$ ,  $\Delta\alpha = \alpha(T) - \alpha(1.48 \text{ K})$ .

Если записывать временную и пространственную зависимости переменных в виде  $\exp[-i(\omega t - \mathbf{kr})]$ , то для нормальной моды имеем выражения

$$\alpha = 1/2 \operatorname{Re}(k) \operatorname{Im}(C) / \operatorname{Re}(C), \quad \Delta v/v = 1/2 \operatorname{Re}(\Delta C) / C, \quad (1)$$

где  $\alpha$  — коэффициент поглощения ультразвука,  $k = \omega/v + i\alpha$  — комплексное волновое число,  $v$  — фазовая скорость ультразвука,  $C$  — упругие модули, связанные с нормальной модой ( $C = \rho v^2$ ,  $\rho$  — плотность материала).

Нами получены температурные зависимости коэффициентов поглощения и скорости нормальных мод, распространяющихся в направлении

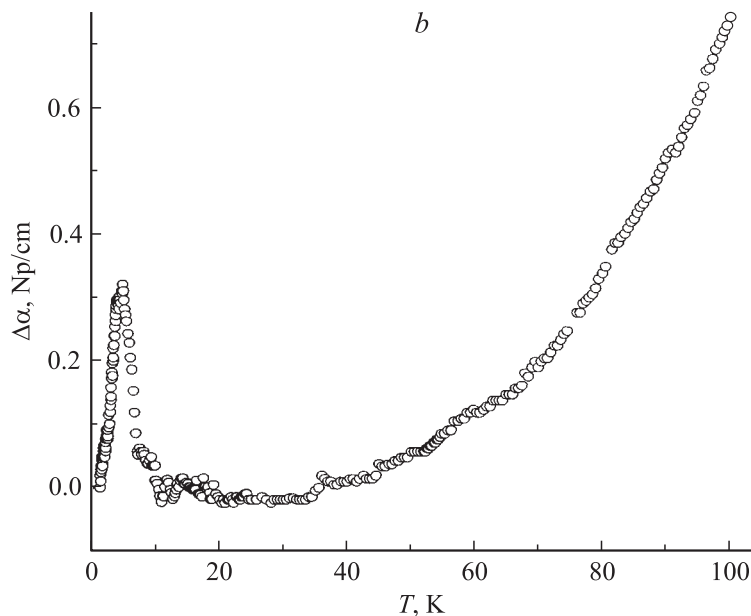
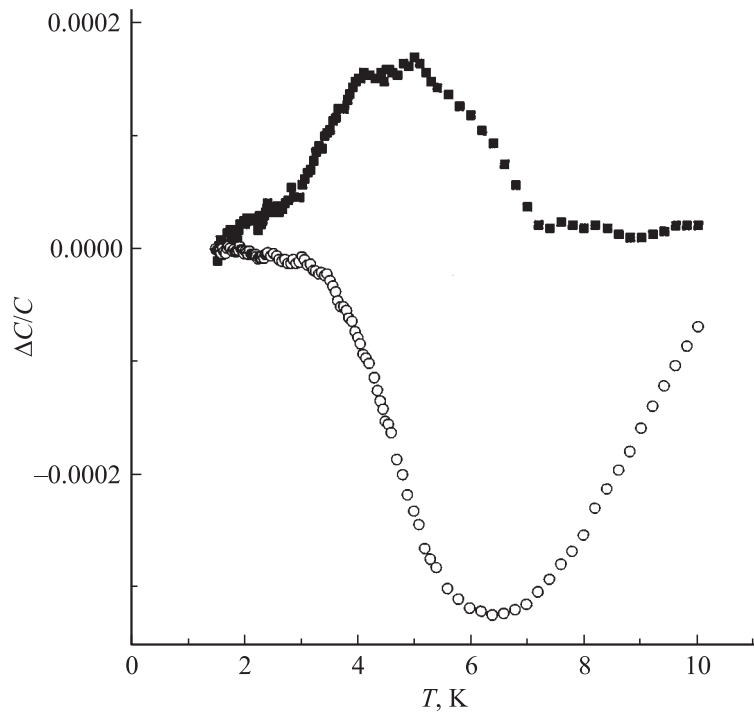


Рис. 1 (продолжение).

(110). В кривых, относящихся к медленной поперечной волне, обнаружены немонотонные зависимости, обусловленные влиянием примесей. В настоящем сообщении мы приводим зависимости, определяемые упругим модулем  $C = (C_{11} - C_{12})/2$ . На рис. 1 показаны результаты, полученные на частоте 51.6 МГц. На рис. 2 представлены температурные зависимости вещественной и мнимой частей упругих модулей. Температурная зависимость примесного вклада в коэффициент поглощения имеет ярко выраженный пик, а скорость звука — соответствующую аномалию вблизи 5 К.

Обнаруженные аномалии ультразвуковых параметров, как и аномалии других кинетических явлений в селениде ртути с примесями железа [1], мы связываем с существованием резонансного энергетического уровня, т.е. уширенного в результате гибридизации донорного энергетического уровня примеси. Выбранная нами концентрация донорных примесей железа отвечает расположению энергии Ферми электронов в



**Рис. 2.** Температурные зависимости вещественной (кружки) и мнимой (квадраты) компонент упругого модуля  $C = (C_{11} - C_{12})/2$  при низких температурах.

интервале гибридных состояний выше резонансной энергии  $\epsilon_r$ . Рассмотрим поглощение ультразвука электронами в гибридных состояниях. Сила, с которой электроны действуют на колеблющуюся кристаллическую решетку, имеет вид:

$$F = \text{grad } Sp\{\rho_e \Lambda\}, \quad (2)$$

где  $\rho_e$  — возмущенная часть матрицы плотности электронов,  $\Lambda$  — оператор тензора деформационного потенциала. Матрицу плотности следует найти из кинетического уравнения, которое мы записываем в приближении времени релаксации  $\tau$ . После решения кинетического уравнения и подстановки силы  $F$  в уравнение движения решетки

получим мнимую часть комплексного модуля упругости в виде

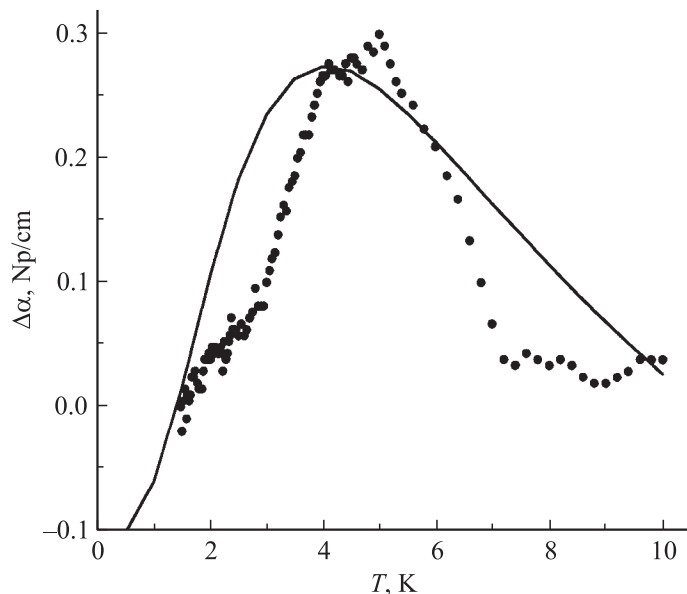
$$\text{Im} C = \Sigma \Lambda_{mn} f'_m G, \quad (3)$$

$$G = (\omega \tau^{-1}) \{ [\Omega_{mn} - \omega]^2 + \tau^{-2} \}^{-1}, \quad (4)$$

где  $\Lambda_{mn}$  — матричный элемент деформационного потенциала между состояниями с квантовыми числами  $m$  и  $n$ ,  $f'_m$  — производная функции Ферми по энергии,  $\Omega_{mn}$  — частоты переходов между рассматриваемыми состояниями. Мы учитываем только вклад резонансных переходов, вызываемых взаимодействием звука с электронами из состояний с энергией  $\varepsilon_r$ , при которых смешиваются компоненты гибридных состояний, отвечающие локализации и свободному движению. Для упрощения считаем соответствующие матричные элементы  $\Lambda$  равными константе, по порядку величины близкой к энергии атомного масштаба. Таким способом мы описываем специфический механизм поглощения ультразвука, обусловленный такими переходами электронов между гибридными состояниями, когда энергия затрачивается на преобразование локализации электронов в исходном состоянии в свободное движение в конечном состоянии. С учетом принятых упрощений коэффициент поглощения ультразвука при частотах, малых по сравнению с  $\tau^{-1}$ , записывается следующим образом:

$$\alpha = A_0 + A_1 \int dx [2 \cosh(x/2)]^{-2} [(xkT - \varepsilon_0)^2 (\tau/\hbar)^2 + 1]^{-1}, \quad (5)$$

где интегрирование распространяется на интервал положительных значений  $x$ ,  $A_0$  — слагаемое, отражающее вклады других механизмов поглощения;  $A_1$  — амплитуда, пропорциональная частоте  $\omega$ , концентрации примесей и квадрату деформационного потенциала  $\Lambda$ ;  $\varepsilon_0 = \varepsilon_F - \varepsilon_r$ ,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми,  $k$  — постоянная Больцмана,  $\hbar$  — постоянная Планка, деленная на  $2\pi$ . Резонансный множитель под интегралом в формуле (5) описывает особенность обнаруженного механизма поглощения звука. Поглощающие энергию звука электроны переходят из пика плотности состояний с энергией  $\varepsilon_r$  на границу Ферми, преобразуя полученную энергию в энергию теплового движения. Поэтому максимальная интенсивность поглощения достигается, когда характерная тепловая энергия  $kT$  оказывается близкой к энергии  $\varepsilon_0$ , что и отражает упомянутый резонансный множитель.



**Рис. 3.** Температурные зависимости измеренного (кружки) и расчетного (сплошная кривая) коэффициента поглощения ультразвука.

На рис. 3 показана подгонка кривой, полученной по формуле (5), к наблюдавшемуся пику поглощения, приведенному на рис. 1. Найденные значения параметров равны  $A_1 = 1 \text{ нр/см}$ ,  $k\tau/\hbar = 0.36 \text{ К}^{-1}$ ,  $\varepsilon_0/k = 9 \text{ К}$ . Значения энергии  $\varepsilon_0$  по порядку величины согласуются с известными, а время релаксации  $\tau$  впервые определено из экспериментальных данных. Отметим, что имеющиеся отклонения подгоночной теоретической кривой от экспериментальной зависимости могут быть связаны со слишком грубым характером аппроксимации матричных элементов деформационного потенциала.

Если обратиться теперь к полученным ранее экспериментальным результатам [3–5], относящимся к упругим характеристикам селенида цинка с примесями переходных элементов, то можно убедиться, что они в качественном отношении весьма схожи с полученными в настоящей работе на селениде ртути с примесями железа. Отличаются в 2–3 раза температура максимума, резонансная поляризация звука и некоторые

детали конкретных зависимостей. Таким образом, наличие аналогия наблюдаемых аномалий, которая может свидетельствовать о схожем характере проявлений гибридизации примесных электронных состояний с состояниями валентной полосы и полосы проводимости.

Итак, в кристалле селенида ртути с примесями железа обнаружены аномалии температурных зависимостей коэффициента поглощения и скорости звука при низких температурах, обусловленные существованием резонансного примесного уровня. В результате подгонки температурной зависимости коэффициента поглощения, предсказываемой простой теорией, к наблюдаемой в эксперименте найдены параметры, характеризующие гибридизованные электронные состояния на примесях железа. Отмечена аналогия наблюдавшихся аномалий температурных зависимостей, связанных с влиянием примесей переходных элементов, в бесщелевом кристалле — селениде ртути и в широкозонном полупроводнике — селениде цинка.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 03-02-16246.

## Список литературы

- [1] *Окулов В.И., Паранчич С.Ю., Сабирзянова Л.Д. и др. // ФНТ. 2004. Т. 30. В. 4. С. 441–446.*
- [2] *Окулов В.И. // ФНТ. 2004. Т. 30. В. 11. С. 1194–1203.*
- [3] *Gudkov V.V., Lonchakov A.T., Sokolov V.I. et al. // Phys. Stat. Sol.(b). 2005. V. 242. P. R30–R32.*
- [4] *Гудков В.В., Лончаков А.Т., Соколов В.И. и др. // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 8. С. 1498–1500.*
- [5] *Gudkov V.V., Lonchakov A.T., Tkach A.V. et al. // J. Electron. Mater. 2004. V. 33. N 7. P. 815–818.*
- [6] *Gudkov V.V., Gavenda J.D. Magnetoacoustic Polarization Phenomena in Solids. New York: Springer-Verlag, 2000. P. 25–30.*