

ОПТИЧЕСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ ЦЕНТРА, ВЫЗЫВАЮЩЕГО ПОЛОСУ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ С МАКСИМУМОМ ВБЛИЗИ 1.18 эВ В GaAs : Te

II. ВЛИЯНИЕ ОДНООСНОГО ДАВЛЕНИЯ НА ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ЦЕНТРА

Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Решиков М. А.,
Седов В. Е., Сосновский В. Р.

При температуре 2 К и одноосных давлениях (P) до 10 кбар в образцах n -GaAs : Te измерена индуцируемая этим давлением поляризация примесной фотолюминесценции (ФЛ) в широкой полосе с максимумом при энергии фотонов ~ 1.18 эВ. Обнаружено, что при давлении вдоль различных осей кристалла ([001], [111], [110]) интегральное поляризационное отношение излучения всегда возрастает, однако с увеличением энергии фотонов в полосе излучения поляризационное отношение растет при $P \parallel [001]$, а при $P \parallel [111]$ падает. Поведение поляризации ФЛ объясняется в модели примесного центра моноклинной симметрии, для которого расщепления возбужденного состояния, вводимые внутренним понижением симметрии, сравнимы с расщеплениями из-за внешнего давления и существенную роль играют вибронные эффекты. Аппроксимацией экспериментальных зависимостей оценены величины параметров излучающего состояния центра (расщепление подуровней возбужденного состояния и его изменение при нулевых колебаниях комплекса, константы деформационного потенциала). Сопоставление этих величин с результатами анализа данных поляризационной спектроскопии [1] позволяет сузить диапазон возможных значений параметров электронного строения примесного центра, вызывающего исследованную ФЛ.

В предыдущей работе [1] обсуждалось поведение поляризованной фотолюминесценции (ФЛ) в полосе с максимумом вблизи энергии фотонов $\hbar\omega_{\text{м}} = 1.18$ эВ в GaAs : Te, связываемой обычно с комплексом $V_{\text{Ga}}\text{T}_{\text{eAs}}$ [2-6]. Поляризационные диаграммы ФЛ при резонансном возбуждении этой полосы были объяснены в предположении, что как в основном, так и в возбужденном состоянии внутреннее искажение примесного центра можно описать как суперпозицию искажений центра T_2 -симметрии вдоль оси $\langle 111 \rangle$ и вдоль оси $\langle 110 \rangle$ (либо вдоль оси $\langle 111 \rangle$ и оси $\langle 001 \rangle$), лежащих в плоскости типа {110}. Это означает, что исследуемый центр имеет не тригональную, а C_2 -симметрию. В настоящей работе приведены измерения указанной полосы ФЛ при одноосных давлениях. Результаты эксперимента анализируются в рамках предложенной в [1] феноменологической модели электронного строения центра. Целью исследований являлось развитие этой модели и уточнение ее параметров.

1. Методика и результаты эксперимента

Исследования ФЛ при одноосном сжатии кристалла проводились в схеме «на отражение» (рис. 1, б в [1]). Методика измерений аналогична описанной в [6]. Образцы были изготовлены из тех же монокристаллов, что и в [1], концентрация свободных электронов составляла $\sim (5-10) \cdot 10^{17}$ см⁻³ при комнатной температуре. Типичные размеры образца $6 \times 1 \times 1$ мм. ФЛ возбуждалась генерацией электронно-дырочных пар излучением He-Ne-лазера (мощность ~ 10 мВт, длина волны 0.6328 мкм). Измерялись спектры интенсивности и поляризационного отношения ФЛ $r = I_{\parallel} / I_{\perp}$ (I_{\parallel} и I_{\perp} — интенсивности ФЛ с электрическим вектором световой волны, соответственно параллельным и перпен-

дискретным оси давления) при одноосном давлении P до 10 кбар. Температура образцов при измерениях составляла ~ 2 К.

Основные результаты измерений представлены на рис. 1—3. Одноосное давление вдоль кристаллографических направлений [001], [111] и [110] приводило к смещению примесной полосы ФЛ в коротковолновую область и линейной поляризации излучения. При этом величина r изменялась по полосе ФЛ и в случае давления вдоль оси [110] зависела от направления наблюдения (рис. 3). Характер зависимости r от $\hbar\omega_n$ для давления вдоль осей [001] и [111] оказался различным: с увеличением $\hbar\omega_n$ при $P \parallel [001]$ r росло, а при $P \parallel [111]$ падало. Существенного уширения полосы ФЛ при величинах P до 10 кбар не наблюдалось, величина r в исследуемой полосе не превышала 3.

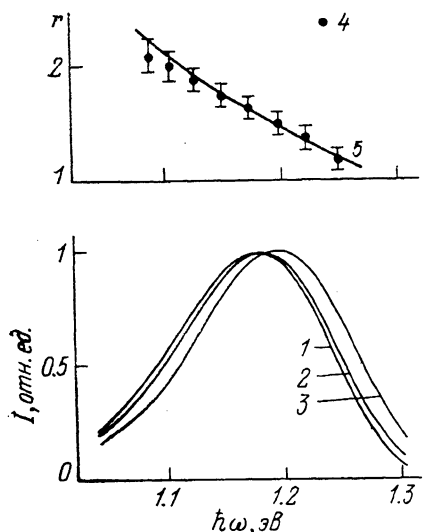


Рис. 1. Спектр ФЛ (1—3) и поляризационное отношение излучения (4, 5) при одноосном давлении вдоль оси [111].

1 — спектр ФЛ при $P=0$; 2, 3, 4 — соответственно I_{\parallel} , I_{\perp} и r при $P=10$ кбар, $T=2$ К; 5 — расчетное r при следующих значениях параметров: $\delta_{111}=100$, $\delta_{110}=22$, $\Delta\delta_{111}=52$, $\Delta\delta_{110}=10$ мэВ, $d=-4.5$ эВ, $\sigma^2=3.5 \cdot 10^{-3}$ эВ², $\Delta c_0=50$ мэВ, $P=10$ кбар.

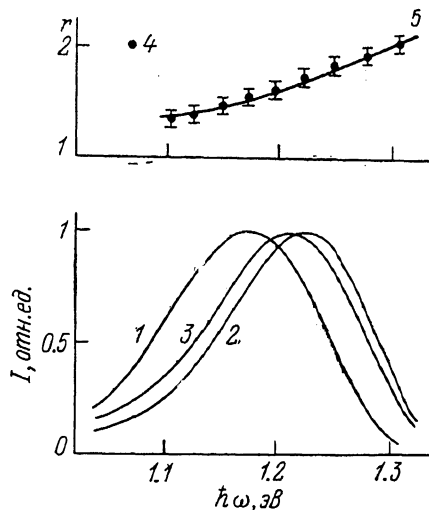


Рис. 2. Спектр ФЛ (1—3) и поляризационное отношение излучения (4, 5) при одноосном давлении вдоль оси [001].

1 — спектр ФЛ при $P=0$; 2, 3, 4 — соответственно I_{\parallel} , I_{\perp} и r при $P=8$ кбар, $T=2$ К; 5 — расчетное r при следующих значениях параметров: $\delta_{111}=100$, $\delta_{110}=22$, $\Delta\delta_{111}=52$, $\Delta\delta_{110}=10$ мэВ, $b=-1$ эВ, $\sigma^2=3.5 \cdot 10^{-3}$ эВ², $\Delta c_0=50$ мэВ, $P=8$ кбар.

2. Качественный анализ

Для центра симметрии C_2 с широкой полосой ФЛ одной из причин изменения r в пределах этой полосы при давлении вдоль главной оси кристалла может быть снятие ориентационного вырождения и расщепление полос излучения групп центров, различным образом ориентированных относительно направления давления. Однако, если существует только этот эффект, интегральная поляризация всей полосы ФЛ должна отсутствовать, что противоречит результатам эксперимента. Оценки внутренних расщеплений подуровней центра в излучательном состоянии [1] показывают, что эти расщепления могут составлять 10—100 мэВ и, следовательно, могут оказаться сравнимыми с расщеплениями, вводимыми внешним одноосным давлением $\sim (1 \div 10)$ кбар. В этих условиях нельзя рассматривать поляризационные характеристики ФЛ при одноосной деформации с неизменными электронными волновыми функциями центра, ограничиваясь лишь учетом изменения энергии состояний различных групп центров при снятии ориентационного вырождения. Влияние внешней деформации необходимо учитывать в матрице исходного гамильтониана (2) статьи [1] совместно с внутренними искажениями (блоховские амплитуды полагаются неизменными). Это приводит к изменению с давлением волновых функций состояний и к возникновению интегральной поляризации ФЛ. Рост величины интегрального поляри-

зационного отношения с увеличением давления (рис. 1—3) свидетельствует о том, что константы деформационного потенциала исследуемого центра в излучающем состоянии b и d (для давления вдоль осей $[001]$ и $[111]$ соответственно) отрицательны. Последнее означает, что с увеличением внешнего давления в электронной волновой функции излучательного состояния возрастает доля составляющих с проекцией полного момента $\pm 1/2$ на ось давления (проекцией орбитального момента 0).

Существенной особенностью спектров поляризационного отношения при одноосных давлениях является уже отмеченное в предыдущем разделе различное поведение r при увеличении $\hbar\omega_{\text{из}}$ в случаях $P \parallel [111]$ и $P \parallel [001]$ (рис. 1, 2). Для центра S_6 -симметрии одинаковый знак констант деформационного потенциала b и d приводит к тому, что в случае снятия ориентационного вырождения

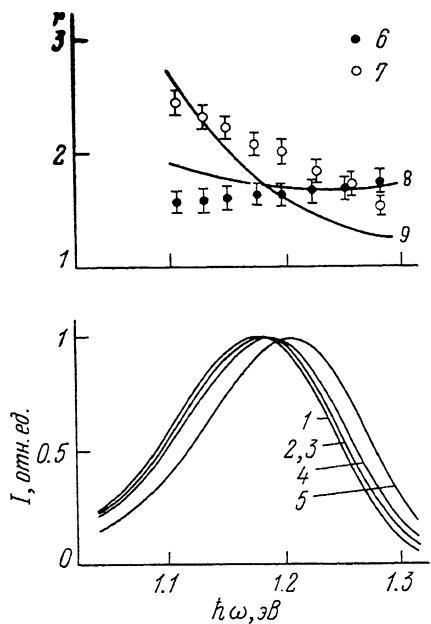


Рис. 3. Спектр ФЛ (1—5) и поляризационное отношение излучения (6—9) при одноосном давлении вдоль оси $[110]$.

1 — спектр ФЛ при $P=0$; 2, 3, 6, 8 — наблюдение со стороны $[1\bar{1}0]$; 4, 5, 7, 9 — наблюдение со стороны $[001]$; 2, 4 — I_{\parallel} ; 3, 5 — I_{\perp} ; 6, 7 — r , $T=2$ К; 8, 9 — расчетные зависимости $r(\hbar\omega_{\text{из}})$ при тех же параметрах, что и на рис. 1, 2. $P=8$ кбар.

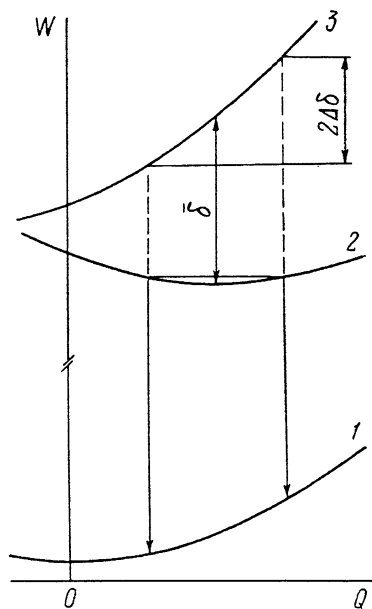


Рис. 4. Адиабатические потенциалы центра.

1 — основное состояние; 2, 3 — подуровни возбужденного состояния, Q — координата, описывающая искажение центра.

при $P \parallel [111]$, $P \parallel [001]$ изменение r по спектру должно иметь одинаковый характер (знак $\partial r/\partial \hbar\omega_{\text{из}}$ должен совпадать).¹ Это указывает на то, что помимо снятия ориентационного вырождения существенное влияние на поведение $r(\hbar\omega_{\text{из}})$ оказывают и другие причины. В рамках рассматриваемой модели дополнительный механизм, изменяющий зависимость $r(\hbar\omega_{\text{из}})$, может быть связан с вибронным взаимодействием [7] и вызван различиями в величинах внутренних искажений центра в момент излучения, обусловленными нулевыми неполносимметричными (относительно решетки кристалла) колебаниями примесного комплекса (рис. 4). Если неполносимметричные колебания дают существенный вклад в ширину полосы ФЛ, то для случая, показанного на рис. 4, коротковолновый край полосы ФЛ формируется излучением, происходящим при меньших искажениях центра, чем искажения, формирующие длинноволновый край. Поэтому внешнее одноосное давление вносит более существенные изменения в электронную волновую функцию излучающего состояния, соответствующую

¹ Более того, ни для какого класса симметрии центра снятие ориентационного вырождения в этих условиях не приводит к противоположности знаков $dr/d\hbar\omega_{\text{из}}$ при $P \parallel [111]$ и $P \parallel [001]$. В частности, для тригонального центра $dr/d\hbar\omega_{\text{из}} \neq 0$ при $P \parallel [111]$ и $dr/d\hbar\omega_{\text{из}} = 0$ при $P \parallel [001]$.

Более коротковолновому излучению, и, следовательно, индуцируемая этим давлением поляризация излучения должна возрастать при увеличении $\hbar\omega_n$ в полосе ФЛ. Если диапазон изменения внутренних искажений центра при нулевых колебаниях достаточно велик, указанный рост может оказаться сильнее, чем падение γ из-за снятия ориентационного вырождения. Помимо электрон-фононного взаимодействия с неполносимметричными колебаниями вклад в ширину полосы ФЛ может давать также взаимодействие с полносимметричными фононами. Именно смещение минимумов адиабатических потенциалов (АП) излучающего и основного состояний в пространстве координат неполносимметричных колебаний приводит при одноосных давлениях к появлению изменения γ по спектру из-за вибронных эффектов в дополнение к зависимости $\gamma(\hbar\omega_n)$ из-за снятия ориентационного вырождения. С другой стороны, взаимодействие с полносимметричными фононами, уширяя спектр, делает эту зависимость более плавной. Таким образом, спектральное распределение γ при заданной величине нагрузки определяется следующими факторами: 1) снятием ориентационного вырождения; 2) относительным вкладом в полную ширину полосы ФЛ полносимметричных и неполносимметричных колебаний; 3) волновыми функциями излучающего состояния, зависящими от внутренних расщеплений; 4) исходными константами деформационного потенциала, от которых зависят изменение волновой функции при внешней нагрузке и величина расщепления полос излучения из-за снятия ориентационного вырождения центров.

3. Аппроксимация зависимостей $\gamma(\hbar\omega_n)$ и оценка параметров модели

Указанные в предыдущем разделе факторы рассматривались при вычислениях частотных зависимостей поляризационного отношения ФЛ исследуемого центра для давлений $P \parallel [001]$, $P \parallel [111]$ и $P \parallel [110]$. В этих вычислениях электронные волновые функции определялись матрицей (2) статьи [1], в которой внешняя деформация учитывалась совместно с внутренней. В соответствии со сказанным в работе [1] предполагалось, что нулевые неполносимметричные колебания примесного комплекса можно представить как одномерные вдоль некоторой обобщенной координаты Q , для которой в диапазоне, определяемом нулевыми колебаниями, при $P=0$ поляризация излучения отдельного центра практически не меняется по спектру полосы ФЛ [1]. Если воспользоваться введенными в [1] параметрами внутреннего расщепления возбужденного состояния δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}), то, как показывают расчеты, последнее требование удовлетворялось для таких искажений центра, при которых зависимость δ_{110} (δ_{001}) от δ_{111} описывалась некоторой прямой, не обязательно проходящей через начало координат. Спектр излучения определялся с использованием полуклассического приближения. Волновая функция колебательного движения вдоль оси Q в излучательном состоянии описывалась гауссианом. Уширение каждой линии излучения вследствие взаимодействия с полносимметричными колебаниями предполагалось также гауссовым (дисперсия уширения σ^2). Аппроксимация экспериментальных зависимостей проводилась вариацией следующих величин: параметров внутренних расщеплений, соответствующих энергии фотона в пике полосы ФЛ δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}), изменений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при уменьшении квадрата волновой функции неполносимметричного колебательного движения центра в излучающем состоянии в e раз: $\pm \Delta\delta_{111}$ и $\pm \Delta\delta_{110}$ ($\pm \Delta\delta_{001}$), констант деформационного потенциала b , d и спин-орбитального расщепления Δ_{so} для возбужденного состояния, дисперсии σ^2 .² Величина деформации, возникающая под влиянием внешнего давления P , определялась стандартными соотношениями с использованием упругих постоянных GaAs [8].

² Для определения спектральных распределений интенсивности ФЛ и поляризационного отношения АП центра могут быть заданы в зависимости от величины параметров расщеплений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}). Величина, заменяющая коэффициент упругости в этих координатах, при условии указанной выше связи δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) полностью определяется параметром δ_{111} . Относительный сдвиг положений минимумов АП излучающего и основного состояний вдоль оси δ_{111} обуславливает вклад неполносимметричных колебаний в ширину полосы ФЛ и поэтому задается экспериментальной шириной этой полосы и выбором σ^2 .

Диапазон значений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}), при которых вариация других параметров модели позволяет достичь удовлетворительного соответствия расчетных зависимостей r ($\hbar\omega_n$) эксперименту (рис. 1—3), показан на рис. 5. Видно, что для описания имеющихся данных пьезоспектроскопии необходимо, чтобы тригональное искажение излучающего состояния было достаточно большим ($|\delta_{111}| \geq 50$ мэВ) и преобладающим над другими искажениями ($|\delta_{111}| \gg |\delta_{110}|, |\delta_{001}|$). Последнее вызвано тем, что, согласно измерениям при $P \parallel [001]$, r ($\hbar\omega_n$) > 1 и увеличивается с ростом $\hbar\omega_n$. Такое поведение может быть связано только с преобладанием вибронного эффекта над эффектом снятия ориентационного вырождения, относительная малость которого при $P \parallel [001]$ обеспечивается для центров с почти тригональным искажением. Величина

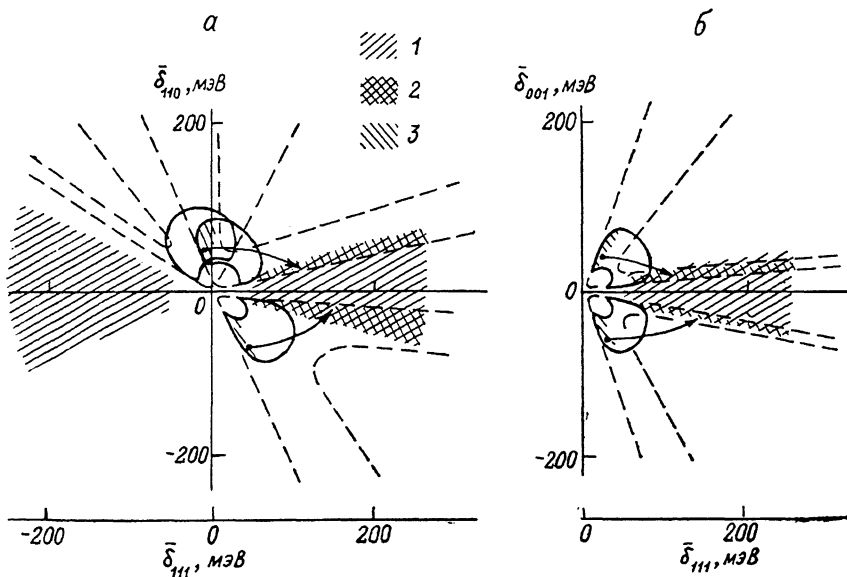


Рис. 5. Области возможных значений δ_{111} и δ_{110} (а) и δ_{111} , δ_{001} (б) при поглощении и излучении.

1 — области значений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при излучении, для которых вариацией других параметров модели можно описать зависимости r ($\hbar\omega_n$); 2 — области значений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при излучении, позволяющие объяснить все экспериментальные данные настоящей работы и работы [1]; 3 — соответствующие этим областям значения δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при поглощении. Сплошной и штриховой линиями соответственно показаны границы областей возможных значений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при поглощении и излучении, полученные только из данных поляризованной ФЛ [1]. Область допустимых значений δ_{111} и δ_{001} в случае «внутреннего растяжения» вдоль оси $\langle 111 \rangle$ (т. е. $\delta_{111} < 0$) не приведена на рис. 5, б, так как в этой области отсутствуют значения расщеплений, объясняющие данные [1].

$2\Delta_{111}$ оказалась сравнимой с $|\delta_{111}|$ и растущей по мере отклонения от чисто тригональной симметрии. Абсолютные значения констант b и d , необходимые для описания эксперимента, росли с увеличением $|\delta_{111}|$ и $|\delta_{110}|$ ($|\delta_{001}|$), а также параметра Δ_{co} , который задавался в диапазоне (0—500) мэВ. Предполагая, что $|b|$ и $|d|$ не превосходят соответствующие параметры для валентной зоны GaAs более чем вдвое, можно ограничить максимально возможную величину $|\delta_{111}|$ значением ~ 250 мэВ (рис. 5). Отметим также, что если предположить, что АП центра в возбужденном и основном состояниях описываются одинаковыми, но сдвинутыми по оси Q параболой, то аппроксимация экспериментальных данных достигалась в случае, когда минимум АП основного состояния находился вблизи $\delta_{111} \approx 0$.

Сопоставляя допустимые значения расщеплений δ_{111} и δ_{110} (δ_{001}) при излучении, полученные из исследований поляризованной ФЛ [1], с результатами анализа пьезоспектроскопических экспериментов (рис. 5), можно значительно сузить область возможных расщеплений подуровней возбужденного состояния, соответствующих равновесному искажению центра при излучении. Эта новая область приблизительно будет определяться перекрытием соответствующих областей возможных расщеплений, полученных в [1] и настоящей работе, и показана на рис. 5. При этом сужается также и область расщеплений возбужден-

ного состояния, отвечающих равновесной конфигурации центра при поглощении фотона (рис. 5). Дополнительное условие постоянства поляризации ФЛ по спектру полосы излучения при резонансном поляризованном возбуждении (см. [1]) практически не изменяет найденные области. При этом диапазон изменения δ_{111} , δ_{110} (δ_{001}) за счет нулевых колебаний может выходить за пределы указанных на рис. 5 областей, поскольку приблизительное постоянство степени поляризации по спектру полосы ФЛ будет в этом случае обеспечиваться усреднением поляризации и уширением линий излучения из-за взаимодействия с полносимметричными фононами ($\sigma^2 \neq 0$).

На рис. 1—3 приведен пример расчетных зависимостей $r(\hbar\omega_n)$. Видно, что расчеты достаточно хорошо согласуются с экспериментом при $P \parallel [111]$ и $P \parallel [001]$. Для случая $P \parallel [110]$ согласие несколько хуже (рис. 3), хотя расчетные кривые качественно правильно описывают поведение $r(\hbar\omega_n)$ при различных направлениях наблюдения ФЛ. Незначительным изменением параметров можно улучшить согласие расчета с экспериментом в этом случае за счет некоторого ухудшения соответствия для $P \parallel [001]$ и $P \parallel [111]$. Отметим, что при параметрах модели, указанных в подписях к рис. 1—3, обеспечивается также практическое постоянство степени поляризации резонансно возбужденной ФЛ по спектру излучения, экспериментально наблюдавшееся в диапазоне $\hbar\omega_n = (1.15 \div 1.30)$ эВ [1].

4. Аналитические выражения для упрощенной модели центра

Численная аппроксимация, описанная в предыдущем разделе, показала, что в излучающем состоянии искажение исследуемого центра хотя и не является полностью тригональным, но близко к нему. В настоящем разделе для иллюстрации влияния различных параметров центра на зависимость $r(\hbar\omega_n)$ при $P \parallel [111]$ и $P \parallel [001]$ мы приведем аналитические выражения для упрощенной модели чисто тригонального центра ($\delta_{111} > 0$, $\delta_{110} = \delta_{001} = 0$) в двух предельных случаях: $\Delta_{co} = 0$ и $\Delta_{co} \rightarrow \infty$. Введем следующие обозначения: E_{111} и E_{001} — параметры, характеризующие расщепление подуровней неискаженного центра только при внешнем давлении соответственно вдоль осей [111] и [001]; $E_{111} = 2\sqrt{3}d\epsilon_{xy} = 2\sqrt{3}d\epsilon_{yz} = 2\sqrt{3}d\epsilon_{zx} = -dP/(\sqrt{3}c_{44})$; $E_{001} = 2b[\epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})/2] = -2bP/(c_{11} - c_{12})$, где $\epsilon_{\alpha\beta}$ — составляющие тензора внешней деформации, оси x, y, z направлены вдоль кристаллографических осей [100], [010] и [001] соответственно, c_{ij} — упругие постоянные, P — величина внешнего давления. В отсутствие внутренних искажений истинные расщепления двух нижних подуровней возбужденного состояния при давлении вдоль осей [111] и [001] равны соответственно $3E_{111}/2$ и $3E_{001}/2$ при $\Delta_{co} = 0$, E_{111} и E_{001} при $\Delta_{co} \rightarrow \infty$. Точно так же в случае только внутреннего искажения центра вдоль оси [111] происходит расщепление подуровней на $3\delta_{111}/2$ при $\Delta_{co} = 0$ и на δ_{111} при $\Delta_{co} \rightarrow \infty$. Введем также безразмерные параметры $Z = E_{001}/\delta_{111}$ и $Y = E_{111}/\delta_{111}$.

Рассмотрим случай сжатия кристалла вдоль оси [001] ($E_{001} > 0$, $E_{111} = 0$). Энергия нижнего возбужденного состояния E при $P \parallel [001]$ для всех центров одинакова и равна

$$E(\Delta_{co} = 0) = -\frac{1}{4}\delta_{111} \left(Z + 1 + 3\sqrt{1 - \frac{2}{3}Z + Z^2} \right), \quad (1)$$

$$E(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = -\frac{1}{2}\delta_{111} \sqrt{1 + Z^2}, \quad (1')$$

т. е. ориентационное вырождение не снимается. Поляризация ФЛ определяется выражениями

$$r(\Delta_{co} = 0) = \frac{16}{(3Z - 1 - 3\sqrt{1 - \frac{2}{3}Z + Z^2})^2}, \quad (2)$$

$$r(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = \frac{4}{1 + \frac{3}{(Z + \sqrt{1 + Z^2})^2}}. \quad (2')$$

Рассмотрим случай сжатия кристалла вдоль оси [111] ($E_{001}=0$, $E_{111} > 0$). При малых давлениях центры, для которых направление внешнего сжатия совпадает с направлением внутреннего искажения (сжатия), понижают энергию нижнего возбужденного подуровня, а остальные центры (которых в 3 раза больше) — повышают. Можно получить следующие выражения для энергий нижних подуровней этих двух групп центров E_1 и E_2 при произвольном давлении вдоль оси [111]:

$$\begin{aligned} E_1(\Delta_{co}=0) &= -\delta_{111}(1+Y), \\ E_2(\Delta_{co}=0) &= -\frac{1}{4}\delta_{111}(1+Y+3U_1), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} E_1(\Delta_{co} \rightarrow \infty) &= -\frac{1}{2}\delta_{111}(1+Y), \\ E_2(\Delta_{co} \rightarrow \infty) &= -\frac{1}{2}\delta_{111}U_2, \end{aligned} \quad (3')$$

где $U_1 = \sqrt{1-14Y/9+Y^2}$, $U_2 = \sqrt{1-2Y/3+Y^2}$. Соответствующие переходам с этих подуровней поляризационные отношения имеют вид

$$\begin{aligned} r_1(\Delta_{co}=0) &= \infty, \\ r_2(\Delta_{co}=0) &= \frac{4(1/3 - Y - U_1)^2}{(5/3 - Y + U_1)^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} r_1(\Delta_{co} \rightarrow \infty) &= 4, \\ r_2(\Delta_{co} \rightarrow \infty) &= \frac{U_2 + Y - 1/3}{U_2 - 1/2Y + 1/6}. \end{aligned} \quad (4')$$

Описывая каждую из расщепившихся линий излучения гауссовой кривой вида $\exp(-\alpha X^2)$, где X — отклонение энергии фотона от максимума линии, α — параметр гауссиана, можно получить выражения для поляризационного отношения и наклона зависимости r ($\hbar\omega_n$) вблизи максимума полосы ФЛ (r_0 и r'_0 соответственно) при $P \parallel [111]$

$$r_0(\Delta_{co}=0) = \frac{4[27U_1^2 + 3U_1(7Y-1) + 8(Y-1)]}{9(Y-U_1-5/3)^2}, \quad (5)$$

$$r_0(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = \frac{10U_2 + 6Y - 2}{7U_2 - 3Y + 1}, \quad (5')$$

$$r'_0(\Delta_{co}=0) = -\frac{2\alpha\delta_{111}U_1(3U_1 + Y + 1)(1 + Y - U_1)}{(Y - U_1 - 5/3)^2}, \quad (6)$$

$$r'_0(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = -\frac{6\alpha\delta_{111}U_2(1 + Y - U_2)(3U_2 - 3Y + 1)}{(7U_2 - 3Y + 1)^2}. \quad (6')$$

Эти формулы справедливы, если расщепление линий ФЛ ориентационно вырожденных центров значительно меньше ширины полосы ФЛ при $P=0$ [$(E_2 - E_1)^2 \ll 2\alpha^{-1}$].

Применим полученные выражения для грубой оценки параметров, характеризующих излучательное состояние исследуемого комплекса. Согласно данным, приведенным на рис. 1 (при $P \parallel [111]$), $\alpha \approx 120$ эВ⁻², $r_0 \approx 1.5$ и $r'_0 \approx -5.8$ эВ⁻¹ при $P=10$ кбар. Подставляя эти данные в (5), (6) или в (5'), (6'), получим $\delta_{111}(\Delta_{co}=0) = 55$ мэВ, $\delta_{111}(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = 400$ мэВ; $d(\Delta_{co}=0) = -2.2$, $d(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = -16$ эВ. Используя найденные значения δ_{111} и данные для $P \parallel [001]$ (рис. 2) ($r_0 \approx 1.6$, диапазон изменения r по ширине полосы ФЛ на уровне в e раз ниже максимальной интенсивности $-(1.4 \div 2)$ при $P=8$ кбар), из (2) или (2') получим $b(\Delta_{co}=0) = -0.5$ или $b(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = -5.6$ эВ, а диапазон изменения δ_{111} при нулевых колебаниях вдоль оси [111] $2\Delta\delta_{111}(\Delta_{co}=0) = 40$ или $2\Delta\delta_{111}(\Delta_{co} \rightarrow \infty) = 340$ мэВ.

Заключение. Как показывает проведенный выше анализ, результаты настоящих пьезоспектроскопических исследований вместе с результатами поляризационной спектроскопии [1] могут быть удовлетворительно объяснены в следующей феноменологической модели электронной структуры центра, вызывающего

ФЛ в широкой полосе с максимумом при энергии фотонов 1.18 ± 0.01 эВ (при $2 \div 77$ К) в GaAs : Te.

1. Центр представляет собой комплекс моноклинной симметрии, которая может быть получена искажением T_d -симметрии решетки одновременно вдоль одной из осей $\langle 111 \rangle$ и одной из осей $\langle 110 \rangle$ (или $\langle 001 \rangle$). Это внутреннее искажение не расщепляет основного состояния центра, электронная волновая функция которого имеет симметрию s -типа. Возбужденное состояние формируется из исходных волновых функций p -типа. Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет этот орбитальный триплет на два уровня, причем нижним оказывается вырожденное состояние симметрии Γ_8 , которое под влиянием моноклинного искажения центра расщепляется на два подуровня. Поскольку величины расщеплений, связанных со спин-орбитальным взаимодействием (Δ_{so}) и понижением симметрии центра (δ), могут быть сравнимы, каждому подуровню может отвечать волновая функция, представляющая собой суперпозицию функций с полным моментом $3/2$ (проекция момента $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$) и $1/2$. Внешнее одноосное давление изменяет эту суперпозицию, поскольку дает расщепление уровней, сравнимое с величиной δ .

2. Соотношение между искажениями центра вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ ($\langle 001 \rangle$) в случаях равновесных конфигураций при поглощении и излучении различно, что является следствием релаксации решетки при возбуждении центра. В соответствии с этим различны и расщепления подуровней возбужденного состояния при указанных равновесных искажениях.

3. Характерной чертой рассматриваемого центра является существенная роль вибронного взаимодействия. Конечность размера являющейся функции колебательного движения в излучающем состоянии (существование «нулевых» колебаний) приводит к целому набору величин моноклинных искажений центра, каждое из которых по-разному смешивает исходные электронные волновые функции возбужденного состояния. Также различно индуцируемое внешним воздействием изменение этих функций для различных колебательных координат. Это наряду со снятием ориентационного вырождения влияет на спектральное распределение поляризационного отношения ФЛ при одноосном давлении.

Величины возможных расщеплений двух нижних подуровней возбужденного состояния, обусловленных искажениями вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ (или $\langle 001 \rangle$), соответствующими равновесным конфигурациям комплекса при поглощении и испускании фотонов, приведены на диаграмме рис. 5. Как видно из рисунка, расщепление подуровней при излучении в основном вызвано тригональными искажениями (внутреннее сжатие вдоль оси $\langle 111 \rangle$). При поглощении расщепление из-за искажения вдоль оси $\langle 110 \rangle$ (или $\langle 001 \rangle$) играет более существенную, а, возможно, и определяющую роль. Эти расщепления в обоих случаях по порядку величины составляют ($10 \div 10^2$) мэВ. При этом значения Δ_{so} могут находиться в диапазоне ($0 \div 500$) мэВ, а константы деформационного потенциала b и d , описывающие поведение возбужденного состояния центра при внешних одноосных деформациях вдоль главных осей кристалла, лежат в интервале разумных величин — ($0.5 \div -10$) эВ [одноосное сжатие увеличивает вклад волновых функций с проекцией полного момента $\pm 1/2$ (проекцией орбитального момента 0) на ось давления].

Предложенная выше модель электронного строения примесного центра не противоречит микроскопическим моделям, предполагающим, что этот центр содержит V_{Ga} и Te_{As} , находящиеся в ближайших узлах решетки [2-4]. Понижение тригональной симметрии такого комплекса до моноклинной, как уже указывалось в [1], может быть вызвано ассоциацией парой $V_{Ga}Te_{As}$ дополнительных дефектов [5] или эффектом Яна—Теллера. Последняя причина представляется весьма вероятной. Действительно, вакансия в кремнии в нейтральном и ионизованном состояниях, как известно [9], подвергнута сильным ян-теллеровским дисторсиям вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Подобное искажение, согласно теоретическим представлениям [10, 11], имеет место и для V_{Ga}^0 и V_{Ga}^- в GaAs. Образование комплекса $V_{Ga}Te_{As}$ может лишь внести возмущение в эти искажения, не устранив их.

Список литературы

- [1] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Решников М. А., Седов В. Е., Сосновский В. Р. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 1. С. 50—57.
- [2] Williams E. W. // Phys. Rev. 1968. V. 168. N 3. P. 922—928.
- [3] Hwang C. J. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 11. P. 4584—4590.
- [4] Guislain H. J., De Wolf L., Clauws P. // J. of Electron. Mat. 1978. V. 7. N 1. P. 83—108.
- [5] Вовненко В. И., Глинчук К. Д., Прохорович А. В. // ФТП. 1976. Т. 10. В. 6. С. 1097—1100.
- [6] Аверкиев Н. С., Аширов Т. К., Гуткин А. А. // ФТП. 1981. Т. 15. В. 10. С. 1970—1977.
- [7] Берсукер И. Б., Полингер В. З. Вибронное взаимодействие в молекулах и кристаллах. М., 1983. 336 с.
- [8] Барановский П. И., Ключков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. Справочник. Киев, 1975. 704 с.
- [9] Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты. М., 1985. 304 с.
- [10] Jaros M., Brand S. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 10. P. 4494—4505.
- [11] Bachelet G. B., Baraff G. A., Schlüter M. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 2. P. 915—925.

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

Получена 7.08.1990
Принята к печати 17.08.1990