

## СИММЕТРИЯ КОМПЛЕКСА $V_{Ga}Te_{As}$ В GaAs И ЕГО ПЕРЕОРИЕНТАЦИЯ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

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

При температурах 2 и 77 К исследовано влияние одноосного давления в диапазоне 0—10 кбар на полосу фотолюминесценции с максимумом вблизи 1.2 эВ в GaAs:Te, связанную с комплексом  $V_{Ga}Te_{As}$ . Результаты эксперимента свидетельствуют о том, что вызывающий эту ФЛ центр переориентируется при низкой температуре и способен выстраиваться в случае приложения к кристаллу одноосной деформации.

Совместный анализ зависимостей поляризации ФЛ от величины и направления давления и полученных ранее поляризационных диаграмм исследуемой полосы ФЛ позволяет установить, что комплекс  $V_{Ga}Te_{As}$  имеет триклинную симметрию. Внутреннее искажение  $T_d$ -симметрии кристалла в месте расположения такого центра можно представить в виде суперпозиции искажений вдоль трех направлений. Два из них лежат в плоскости типа {110} и при низкой температуре являются фиксированными для каждого отдельного центра. Третье искажение, направление которого совпадает с осью (111), не лежащей в плоскости фиксированных искажений, переориентируется, что позволяет центру принимать одну из двух эквивалентных ориентаций. В условиях одноосного давления происходят снятие ориентационного вырождения между группами центров с различной ориентацией плоскости фиксированного искажения и выстраивание центров в отдельных группах. Предполагается, что переориентирующееся и одно из фиксированных искажений связаны с эффектом Яна—Теллера, а второе фиксированное искажение связано с исходной анизотропией пары  $V_{Ga}Te_{As}$ .

Оптическая анизотропия комплекса  $V_{Ga}Te_{As}$  в GaAs наблюдалась в работах [1, 2]. В [2] было установлено, что поляризационные диаграммы (ПД) его фотолюминесценции (ФЛ) (широкая полоса с максимумом вблизи энергии фотонов 1.2 эВ) не могут быть объяснены в предположении о тригональной симметрии комплекса, но хорошо описываются в модели центра моноклинной симметрии с жестко связанными ориентациями поглощающего и излучающего диполей. При этом расщепления электронных уровней вследствие понижения симметрии и исходные константы деформационного потенциала центра, как показали исследования поляризации ФЛ при одноосных давлениях  $P = 8 \div 10$  кбар, имели разумную величину [3]. Причиной понижения симметрии комплекса  $V_{Ga}Te_{As}$  по сравнению с тригональной, как полагалось в работах [2, 3], может быть электронно-колебательное взаимодействие (эффект Яна—Теллера).

В настоящей работе выполнено детальное исследование поведения ФЛ комплекса  $V_{Ga}Te_{As}$  при  $P = 0 \div 10$  кбар. Полученные зависимости указывают на выстраивание центров в возбужденном состоянии при определенных направлениях давления и, следовательно, свидетельствуют о возможности изменения ориентации возбужденного центра в условиях отсутствия внешней деформации. Это означает, что ориентация излучающего диполя не жестко связана с ориентацией поглощающего диполя, т. е. при возбуждении отдельного центра возможно возникновение различно ориентированных излучателей, полные энергии которых в отсутствие давления равны. Последнее требует пересмотра интерпретации ПД и уточнения симметрии центра. Подобный анализ также проведен в настоящей работе.

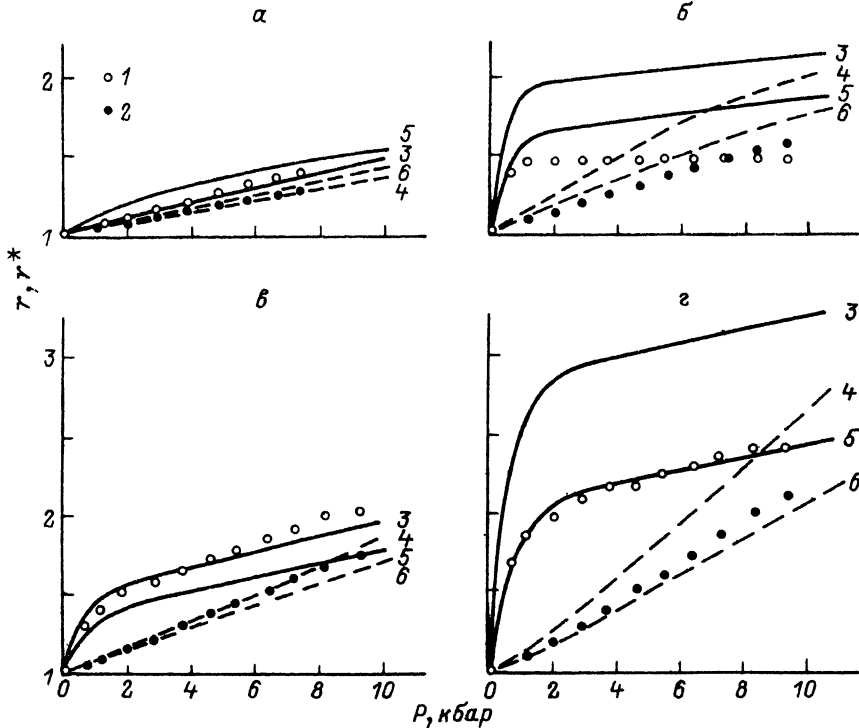


Рис. 1. Зависимости поляризационного отношения ФЛ в полосе с максимумом при 1.2 эВ от величины одноосного давления.

Точки — экспериментальные значения  $r$  при  $\hbar\omega_{\text{и}} = 1.2$  эВ и межзонном возбуждении.  $T, K$ : 1 — 2, 2 — 77. Направление давления: а — [001]; б — [111]; в, г — [110]; направление наблюдения ФЛ: в —  $[1\bar{1}0]$ , г — [001]. Линии — расчетные зависимости  $r^*$  при следующих значениях параметров модели:  $\delta_{111}^{V_{11}^{33}}$ , мэВ: 3, 4 — 120, 5, 6 — 100;  $\delta_{111}^{V_{11}^{33}}$ , мэВ: 3, 4 — -24, 5, 6 — -90;  $\delta_{001}^{V_{11}^{33}}$ , мэВ: 3, 4 — -60, 5, 6 — -80;  $\Delta_{\text{CO}}$ , мэВ: 3, 4 — 130, 5, 6 — 270; б, эВ: 3, 4 — -0.8; 5, 6 — -1; д, эВ: 3, 4 — -2.2, 5, 6 — -2.7;  $T, K$ : 3, 5 — 6, 4, 6 — 77.

## 1. Результаты эксперимента

Исследование ФЛ при одноосном сжатии кристалла проводилось по методике и на образцах GaAs : Te с концентрацией электронов  $(5 \div 10) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , описанных в [3]. Возбуждение ФЛ осуществлялось аргоновым лазером (длина волны  $\sim 0.5$  мкм) либо монохроматическим светом с энергией фотонов в диапазоне 1.4 ÷ 1.6 эВ, получаемым с помощью монохроматора от лампы накаливания. Как и в [2, 3], в первом случае измерения ФЛ проводились в схеме «на отражение», во втором случае использовалась ортогональная схема. Спектр исследованной полосы ФЛ приведен в работах [2, 3]. Другой характеристикой ФЛ является поляризационное отношение излучения  $r$ , т. е. отношение интенсивностей света с электрическим вектором, ориентированным параллельно и перпендикулярно оси давления. Зависимость поляризации ФЛ от энергии фотонов излучаемого света ( $\hbar\omega_{\text{и}}$ ) и величины  $P$  при различных направлениях давления и температурах позволяет судить о симметрии центра, снятии ориентационного вырождения и т. п.

На рис. 1 приведены полученные в случае межзонного возбуждения зависимости  $r$  от величины  $P$  для ФЛ при энергии фотонов  $\hbar\omega_{\text{и}} = 1.2$  эВ (близкой к энергии максимума полосы ФЛ  $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ ). Как показали исследования, интегральное по всей полосе поляризационное отношение  $r^*$  мало отличалось от  $r$

при  $\hbar\omega_n = 1.2$  эВ. Как видно из рис. 1, при давлении вдоль оси [111] или [110] и  $T = 2$  К наблюдается быстрый рост  $r(P)$  с последующим насыщением. При  $T = 77$  К  $r(P)$  растет медленно, постепенно приближаясь к величине, полученной при  $T = 2$  К. При давлении вдоль оси [001]  $r(P)$  растет линейно с почти одинаковыми наклонами при обеих температурах.

Сильные различия в начальных наклонах зависимостей  $r(P)$  при  $T = 2$  и 77 К в случаях  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  (примерно в 10—20 раз) однозначно свидетельствует о том, что при одноосном сжатии вдоль этих осей исходно вырожденные возбужденные состояния отдельного центра расщепляются и перезаселяются (по-видимому, в соответствии с термодинамическим равновесием). Так как при  $P \parallel [001]$  вид зависимости  $r(P)$  почти не меняется при изменении температуры от 2 до 77 К, можно предположить, что указанное расщепление соответствует снятию вырождения различных ориентационных состояний возбужденного центра (а не расщеплению случайно вырожденных при  $P = 0$  электронных состояний), т. е. при  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  происходит выстраивание центров. Отметим, что, поскольку при  $T = 2$  К давление до 1 кбар не вызывает заметного уменьшения интенсивности ФЛ, наблюдаемый при небольших  $P$  быстрый рост  $r(P)$  в случаях  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  связан именно с выстраиванием, а не с гашением ФЛ определенно ориентированных центров. Вид зависимостей  $r(P)$  при  $T = 2$  и 77 К в области  $P < 1$  кбар при  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  свидетельствует о том, что выстраивание наблюдается и при малых  $P$ , т. е. переориентация, по всей вероятности, происходит и в отсутствие давления.

В случае  $P \parallel [001]$  выстраивание если и есть, то не столь заметно, т. е. конфигурации комплекса, между которыми происходят переходы при переориентации отдельного центра, отвечают таким собственным (внутренним) искажениям исходной  $T_d$ -симметрии кристалла в месте расположения центра, которые остаются эквивалентными или почти эквивалентными при давлении вдоль оси [001]. Если, как и в [2, 3], искажение центра представлять в виде суперпозиции искажений вдоль главных кристаллографических осей, то последнее утверждение означает, что компонентой искажения, изменяющей свое направление при переориентации, является искажение вдоль оси  $\langle 111 \rangle$ .

Отметим, что характерные особенности поведения  $r(P)$  (сильно различающиеся для  $T = 2$  и 77 К начальные скорости возрастания  $r$  с ростом  $P$  при  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$ , существование на зависимости  $r(P)$  в этих случаях второго участка, который можно трактовать как переход к насыщению, линейная зависимость  $r(P)$  при  $P \parallel [001]$ ) наблюдались и при других энергиях фотонов  $\hbar\omega_n$  в исследуемой полосе ФЛ, а также при резонансном возбуждении ФЛ светом с энергией  $\hbar\omega_n = 1.40 \div 1.47$  эВ. Однако величина  $r$  и ее изменение с  $P$  при разных  $\hbar\omega_n$  и  $\hbar\omega_b$  были различны. Подобное поведение  $r$ , как уже обсуждалось в [3], может быть объяснено расщеплением полосы ФЛ из-за снятия давлением ориентационного вырождения между отдельными группами центров. Такие группы существуют даже в условиях полного выстраивания центров из-за переориентации только некоторых компонент их внутреннего искажения. Кроме того, на вид зависимости  $r(\hbar\omega_n)$  при одноосном давлении оказывают влияние вибронное взаимодействие и изменение волновых функций дефекта из-за внешних деформаций [3].

## 2. Анализ поляризационных диаграмм центра $V_{Ga}Te_{As}$ с учетом его переориентации в излучающем состоянии

Для проверки справедливости высказанного в предыдущем разделе предположения о переориентации центра в возбужденном (излучающем) состоянии необходимо рассмотреть, не противоречит ли это предположение ПД центра  $V_{Ga}Te_{As}$ , полученным в работе [2]. Ранее [2] эти диаграммы интерпретировались без учета возможной переориентации в предположении о жесткой связи между

ориентациями излучающего и поглощающего осцилляторов (или, что то же, между искажениями центра в поглощающем и излучающем состояниях).

В настоящей работе расчеты ПД и поляризации ФЛ при одноосном сжатии осуществлялись с учетом возможности переориентации центра. При вычислениях будем считать, что исходные волновые функции основного и возбужденного состояний преобразуются соответственно по  $A_1$ - и  $T_2$ -представлениям группы симметрии  $T_d$ . Этот случай в рамках используемого нами приближения (3) эквивалентен предположению о  $s$ - и  $p$ -типах основного и возбужденного состояний, которое применялось в работах [2, 3]. Как и в [2, 3], будем полагать, что исходные состояния центра модифицируются из-за спин-орбитального взаимодействия, характеризуемого параметром расщепления  $T_2$ -состояния  $\Delta_{co}$ , и искажения исходной  $T_d$ -симметрии. Искажения центра в обоих состояниях будем рассматривать как суперпозицию искажений вдоль главных кристаллографических осей. Легко показать, что для существования в ПД зависимости степени поляризации ФЛ ( $\rho$ ) от угла между плоскостью поляризации падающего на кристалл света и вертикалью ( $\eta$ ) необходимо наличие в каждом отдельном центре фиксированных (т. е. непереоориентирующихся) компонент искажения, понижающих исходную  $T_d$ -симметрию кристалла. Поскольку такая зависимость  $\rho(\eta)$  наблюдалась в эксперименте (рис. 4 в [2]), необходимо считать, что симметрия центра в излучающем состоянии может быть описана путем суперпозиции не менее двух компонент искажения: фиксированной и переориентирующейся. При этом величины искажений при возбуждении и излучении могут быть различны.

Возмущения  $T_d$ -симметрии, вызванные внутренними искажениями, в излучающем (поглощающем) состоянии будем описывать, как и в [2], параметрами расщепления возбужденного состояния  $\delta_{111}^{изл}(\delta_{111}^{погл})$ ,  $\delta_{001}^{изл}(\delta_{001}^{погл})$  и  $\delta_{110}^{изл}(\delta_{110}^{погл})$ , которые аналогичны расщеплениям, обусловленным соответствующими внешними деформациями. Связь этих параметров с эффективными внутренними деформациями центра может быть представлена в виде

$$\delta_{111}^{изл}(\delta_{111}^{погл}) = 2\sqrt{3}d'\epsilon'_{xy}, \quad (1)$$

$$\delta_{001}^{изл}(\delta_{001}^{погл}) = 2b'\epsilon'_1, \quad (2)$$

$$\delta_{110}^{изл}(\delta_{110}^{погл}) = -4d'\epsilon'_{xy}/\sqrt{3} = 4b'\epsilon'_1, \quad (3)$$

где  $b'$  и  $d'$  имеют смысл констант деформационного потенциала возбужденного состояния для внутренних искажений;  $\epsilon'_1 = \epsilon'_{zz} - (\epsilon'_{xx} + \epsilon'_{yy})/2$ ;  $\epsilon'_{ab}$  — компоненты тензора внутренней деформации в излучающем (поглощающем) состоянии; оси  $x, y, z$  направлены вдоль осей  $\langle 001 \rangle$  [2]. Параметры расщепления представляют собой разность энергий (расщепление) двух нижних подуровней возбужденного состояния в случае существования внутреннего искажения только вдоль одной оси  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 001 \rangle$  или  $\langle 110 \rangle$  соответственно и  $\Delta_{co} \rightarrow \infty$ . При  $\Delta_{co} = 0$  эта разность в случае искажения вдоль одной оси будет в 1.5 раза больше. При конечном ненулевом значении  $\Delta_{co}$  величины расщеплений принимают промежуточные значения [2]. Подробно связь уровней энергии возбужденного состояния и вероятностей оптических переходов с  $\delta_{lmn}$  рассмотрена в [2].

В случае переориентации центров в излучающем состоянии при вычислении ПД в отличие от [2] необходимо учитывать, что центр, имеющий при поглощении определенную ориентацию, в излучающем состоянии может оказаться в любой из своих эквивалентных конфигураций. Естественно, эти эквивалентные конфигурации имеют тождественный набор фиксированных компонент искажения и различаются только направлениями тех компонент, которые способны переориентироваться. Кроме того, при вычислениях мы предполагали, что в

<sup>1</sup> Последнее равенство справедливо в сферическом приближении.

условия измерения ПД все возможные ориентации центра в поглощающем состоянии равновероятны, так как при измерениях не наблюдалось заметного «высвечивания» центров определенной ориентации. Последнее возможно, если, например, переориентация центров имеет место и в поглощающем состоянии или если время высвечивания центров определенной ориентации велико по сравнению со временем измерений.

С учетом указанных обстоятельств нами с помощью методики, использованной в [2], были рассчитаны ПД ряда анизотропных центров начиная с простейших. В качестве переориентирующей компоненты искажения  $T_{\sigma}$ -симметрии локального центра в излучающем состоянии на основании качественных соображений, приведенных в предыдущем разделе, были выбраны искажения вдоль направлений  $\langle 111 \rangle$ . Число таких эквивалентных направлений в каждом центре в зависимости от направления и количества фиксированных компонент искажения оказывается равным 4 (число осей типа  $\langle 111 \rangle$ ), 3 или 2 (минимальное число для существования переориентации). Соответствующий таким искажениям параметр расщепления далее обозначается как  $\delta_{111}^{\text{изл}}$ . Аналогичное искажение в поглощающем состоянии (не обязательно переориентирующееся) имеет параметр  $\delta_{111}^{\text{полг}}$ .

Расчет в наиболее простых моделях, предполагающих существование в каждом центре, помимо переориентирующегося искажения, одного фиксированного искажения вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  или  $\langle 111 \rangle$ , показал, что ни одна из них не может удовлетворительно объяснить результаты поляризационной спектроскопии [2]. Так, в случае фиксированного искажения вдоль оси  $\langle 111 \rangle$  в ПД, соответствующей ориентации кристалла относительно направлений падающего света и наблюдения ФЛ типа  $(100) \rightarrow (010)$ ,  $\rho(0) = \rho(90)$ , что противоречит эксперименту [2]. Для фиксированного искажения вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  аналогичный результат был получен в ПД, соответствующих ориентациям кристалла типа  $(110) \rightarrow (001)$  и  $(100) \rightarrow (011)$ , тогда как в [2] наблюдалось, что  $\rho(0) \neq \rho(90)$ .

В случае фиксированного искажения вдоль оси  $\langle 110 \rangle$  и переориентирующегося искажения вдоль направлений типа  $\langle 111 \rangle$ , лежащих в плоскости, перпендикулярной оси фиксированного искажения, при определенных соотношениях параметров  $\Delta_{\text{со}}$ ,  $\delta_{111}^{\text{изл}}$ ,  $\delta_{110}^{\text{изл}}$ ,  $\delta_{111}^{\text{полг}}$ ,  $\delta_{110}^{\text{полг}}$  (например,  $\delta_{110}^{\text{изл}} / \delta_{111}^{\text{изл}} = -0.2$ ,  $\Delta_{\text{со}} / \delta_{111}^{\text{изл}} = -1$ ,  $\delta_{110}^{\text{полг}} = \delta_{110}^{\text{изл}}$ ,  $\delta_{111}^{\text{полг}} = \delta_{111}^{\text{изл}}$ ) удавалось построить ПД, близкие к полученным в [2]. Однако при этом возникали значительные трудности при попытке количественного объяснения некоторых данных по пьезоспектроскопии.

Поэтому мы рассмотрели модель, в которой искажение центра представлено в виде суперпозиции трех искажений: двух фиксированных — вдоль оси типа  $\langle 111 \rangle$  и вдоль оси типа  $\langle 001 \rangle$  [с параметрами искажения соответственно  $\delta_{111}^{\text{изл}}$  ( $\delta_{111}^{\text{полг}}$ ) и  $\delta_{001}^{\text{изл}}$  ( $\delta_{001}^{\text{полг}}$ )] и одного переориентирующегося — вдоль одной из двух осей типа  $\langle 111 \rangle$ , лежащих в плоскости, перпендикулярной плоскости типа  $\{110\}$ , в которой находятся оси двух фиксированных искажений. Таким образом, каждый центр принимает одну из двух возможных ориентаций, соответствующих направлению переориентирующегося искажения вдоль одной из двух указанных эквивалентных осей. ПД, полученные в этой модели, хорошо совпадают с экспериментальными [2] при величинах параметров расщепления, лежащих в широком диапазоне значений.<sup>2</sup> При этом, как показывают расчеты, существенным является выполнение следующих условий.

1) Величины  $\delta_{001}^{\text{изл}}$  и  $\delta_{001}^{\text{полг}}$  должны отличаться от нуля, ибо только это условие обеспечивает отличие от нуля величины  $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(90)$  в ПД для ориентации кристалла типа  $(100) \rightarrow (010)$ . Наблюдаемое в экспериментальных ПД соотношение

<sup>2</sup> Расчет ПД в случае существования трех и более составляющих внутреннего искажения аналогичен описанному в [2], поскольку учет нескольких составляющих сводится к предварительному суммированию одинаковых компонент матриц гамильтониана внутренней деформации для каждого вида искажения и дальнейшим операциям с этими суммами.

значений  $\Delta_r$  для различных ориентаций кристалла  $[^2]$  накладывает более строгое ограничение на относительную величину  $\delta_{001}^{изл}$  и  $\delta_{001}^{погл}$ :

$$\frac{|\delta_{001}^{погл}|}{|\delta_{111}^{погл}| + |\delta_{111}^{изл}|} = 0.2+0.6, \quad \frac{|\delta_{001}^{изл}|}{|\delta_{111}^{изл}| + |\delta_{111}^{погл}|} = 0.2+0.6. \quad (4)$$

2) Поскольку для всех ориентаций кристалла  $\Delta_r$  уменьшается с ростом относительной величины  $\Delta_{co}$ , для получения ПД, наблюдаемых в эксперименте  $[^2]$ , необходимо, чтобы наибольшее из значений  $|\delta_{1mn}^{изл}|$ ,  $|\delta_{1mn}^{погл}|$  превышало  $0.2\Delta_{co}$ .

В качестве примера укажем, что хорошее совпадение расчетных и экспериментальных ПД  $[^2]$  было получено при

$$\delta_{001}^{изл} / \tilde{\delta}_{111}^{изл} = \delta_{001}^{погл} / \tilde{\delta}_{111}^{погл} = -0.5, \\ \delta_{111}^{изл} / \tilde{\delta}_{111}^{изл} = \delta_{111}^{погл} / \tilde{\delta}_{111}^{погл} = -0.2, \quad \tilde{\delta}_{111}^{погл} / \delta_{111}^{изл} = 0.2, \quad \Delta_{co} / \tilde{\delta}_{111}^{изл} = 1.1.$$

Отметим, что при выбранном соотношении параметров  $\delta_{1mn}^{изл}$  ( $\delta_{1mn}^{погл}$ ) в случае увеличения (уменьшения) отношения  $\tilde{\delta}_{111}^{погл} / \delta_{111}^{изл}$  в  $n$  раз для сохранения совпадения расчетных и экспериментальных ПД следует увеличить (уменьшить) отношение  $\Delta_{co} / \tilde{\delta}_{111}^{изл}$  примерно в  $\sqrt{n}$  раз. Расчеты также показывают, что при выполнении указанных условий хорошее совпадение с экспериментом может быть получено и в случае, если  $\delta_{1mn}^{изл} / \tilde{\delta}_{111}^{изл} \neq \delta_{1mn}^{погл} / \tilde{\delta}_{111}^{погл}$  (например, одно из искажений одинаково по величине при поглощении и излучении, а величины двух других различны).

### 3. Влияние одноосного давления на адиабатические потенциалы комплекса и его выстраивание в излучающем состоянии

Согласно сказанному в предыдущем разделе, ПД комплекса  $V_{Gv}Te_{As}$  хорошо описываются в модели центра, имеющего два фиксированных искажения (вдоль осей  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$ ) и одно переориентирующееся (вдоль оси  $\langle 111 \rangle$ ). Оси фиксированных искажений лежат в плоскости типа  $\{110\}$  (плоскость фиксированных искажений). В кубическом кристалле существует 6 таких плоскостей различной ориентации. Поскольку в каждой такой плоскости лежат две оси типа  $\langle 111 \rangle$ , вдоль которых может быть направлено фиксированное искажение, всего существует 12 пар различно ориентированных фиксированных искажений. Переориентирующееся искажение направлено вдоль одной из двух осей типа  $\langle 111 \rangle$ , лежащих в плоскости, перпендикулярной плоскости фиксированных искажений. Например, для центра с фиксированными искажениями вдоль оси  $[111]$  и оси  $[001]$  плоскостью фиксированных искажений будет плоскость  $(1\bar{1}0)$ , а переориентирующееся искажение будет направлено вдоль оси  $[1\bar{1}1]$  или  $[\bar{1}11]$ .

Рассмотрим теперь, как при одноосном давлении будет сниматься ориентационное вырождение центров и происходить их выстраивание.

При сжатии кристалла вдоль оси  $[111]$  ориентационное вырождение 12 различных пар фиксированных искажений центра частично снимается. Можно выделить три характерные группы центров, по-разному реагирующих на это давление. У первой группы фиксированное искажение вдоль оси  $[111]$  совпадает с осью давления (рис. 2, тип *Л*). Эта группа содержит центры с тремя различными ориентациями плоскости фиксированных искажений соответственно трем осям  $[001]$ ,  $[010]$ ,  $[100]$  другого фиксированного искажения. У второй группы, центры которой имеют те же плоскости фиксированных искажений, направление фиксированного искажения типа  $\langle 111 \rangle$  не совпадает с осью давления (рис. 2, тип *И*). Три других плоскости  $\{110\}$ , не содержащие оси давления, являются плоскостями фиксированных искажений центров третьей группы (рис. 2, типы *III*, *IV*,

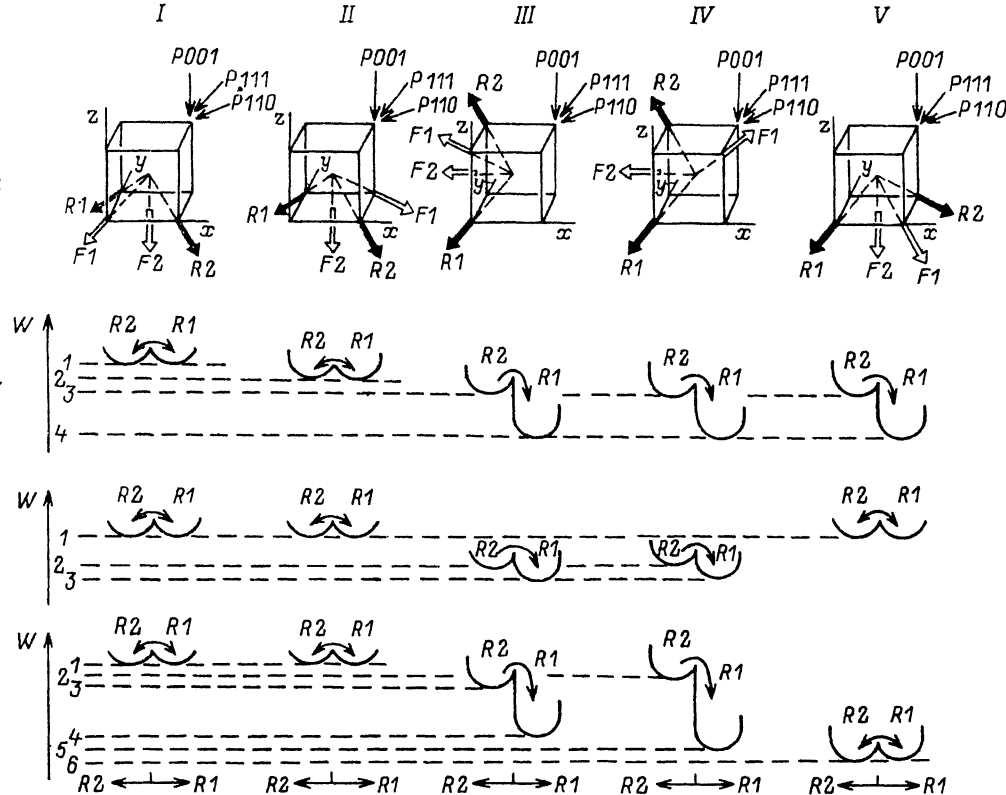


Рис. 2. Влияние одноосного давления на адиабатические потенциалы излучающего состояния различно ориентированных возбужденных центров с внутренними искажениями вдоль трех осей типа  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$ .

I-V — типы ориентаций центра относительно оси давления. а — ориентация осей внутренних искажений центра и внешнего давления. Стрелками  $P_{111}$ ,  $P_{110}$ ,  $P_{001}$  показаны оси внешнего давления.  $F_1$ ,  $F_2$  — оси фиксированных внутренних искажений,  $R_1$ ,  $R_2$  — ось переориентирующегося внутреннего искажения. б-г — схематическое изображение адиабатических потенциалов излучающего состояния центра при двух возможных направлениях переориентирующегося искажения вдоль оси типа  $\langle 111 \rangle$ . Направление внешнего давления: б —  $[111]$ , в —  $[001]$ , г —  $[110]$ . 1-6 — номера уровней энергии нижнего возбужденного состояния, принадлежащих различно ориентированным центрам. Расположение минимумов адиабатических потенциалов соответствует следующим знакам параметров центра:  $\delta_{111}^1, \delta_{001}^1 < 0$ ,  $\delta_{111}^2, \delta_{001}^2 > 0$ ,  $E_{111}, E_{001} > 0$ .

У. В этом случае ось давления лежит в плоскости переориентирующихся искажений.

Очевидно, что центры первой и второй группы при давлении вдоль оси  $[111]$  не будут выстраиваться, так как в них переориентирующиеся искажения вдоль оси  $\langle 111 \rangle$  симметричны относительно всей совокупности внешней и внутренних фиксированных деформаций. В центрах же третьей группы одно из направлений переориентирующегося искажения совпадает с осью внешнего давления, а второе — не совпадает. Следовательно, два состояния таких центров при давлении вдоль оси  $[111]$  становятся неэквивалентными и возможно выстраивание центров. Эти симметричные соображения подтверждаются вычислениями энергий возбужденного (излучающего) состояния центров в различных ориентациях в рамках указанной модели (см. раздел 4). Результаты расчетов для различных групп центров представлены схематически на рис. 2 в виде одномерных адиабатических потенциалов  $W$ , зависящих только от обобщенных координат, которые описывают переориентирующиеся искажения.

При сжатии кристалла вдоль оси [001] можно выделить две группы центров. Одна группа содержит центры такой ориентации, в которой фиксированное искажение типа  $\langle 001 \rangle$  совпадает с осью внешнего давления (рис. 2, типы *I, II, V*). Таких центров 4 по числу возможных направлений второго фиксированного искажения. В другой группе (8 центров) направление фиксированного искажения типа  $\langle 001 \rangle$  не совпадает с осью внешнего давления (рис. 2, типы *III, IV*).

Центры первой группы не будут выстраиваться при давлении вдоль оси [001], поскольку переориентирующиеся искажения в них симметричны относительно всей совокупности внешней и фиксированных внутренних деформаций. Во второй группе это условие нарушается, и возможно выстраивание центров. Как показывают расчеты, разница энергий двух переориентирующихся состояний в этом случае зависит от параметра  $\Delta_{co}$  и при  $\Delta_{co} \rightarrow \infty$  стремится к нулю. Схематическое изображение адиабатических потенциалов центров различных ориентаций при  $P \parallel [001]$  приведено на рис. 2, в.

При сжатии кристалла вдоль оси [110] существуют четыре группы центров: две — перестраивающихся (рис. 2, типы *III, IV*) и две — неперестраивающихся (рис. 2, типы *I, II, V*). В одной из последних групп (центры типа *I* и *II*) ось внешней деформации лежит в плоскости фиксированных внутренних искажений, а в другой группе (центры типа *V*) — перпендикулярна ей. При этом, очевидно, в обеих группах эквивалентность двух переориентирующихся искажений относительно плоскости фиксированных искажений, существовавшая при  $P = 0$ , сохраняется и при  $P \neq 0$ . Тем не менее ориентационное вырождение двух групп центров, отличающихся положением фиксированных искажений относительно оси давления, снимается (рис. 2, з). Для групп перестраивающихся центров (типы *III* и *IV*) направление нагрузки составляет разные углы с двумя возможными направлениями переориентирующегося искажения. Различие в абсолютных положениях уровней энергии центров *III* и *IV* типов зависит от величины  $\Delta_{co}$  и стремится к 0 при  $\Delta_{co} \rightarrow \infty$ .

#### 4. Влияние одноосного давления на поляризацию фотолюминесценции при межзонном возбуждении

Как было показано в предыдущем разделе, давление вдоль направлений [111], [001] или [110] снимает ориентационное вырождение рассматриваемых комплексов в возбужденном (излучающем) состоянии, и энергия нижнего уровня имеет 3, 4 или 6 значений, отвечающих различным ориентациям центра. Расчет интенсивностей излучения различной поляризации и положений уровней в условиях одноосной нагрузки выполнялся аналогично [2, 3] с помощью феноменологического гамильтониана. При этом компоненты матрицы гамильтониана внешней деформации выражались через параметры расщепления уровней из-за внешней нагрузки:

$$E_{111} = 2\sqrt{3}d\epsilon_{xy} = -dP/(\sqrt{3}c_{44}), \quad (5)$$

$$E_{001} = 2b(\epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})/2) = -2bP/(c_{11} - c_{12}), \quad (6)$$

где  $d$  и  $b$  — исходные константы деформационного потенциала возбужденного состояния центра,  $\epsilon_{\alpha\beta}$  — компоненты тензора внешней деформации,  $c_{ij}$  — упругие константы GaAs,  $P$  — величина давления. Выстраивание центров в соответствии с рис. 2 учитывалось перераспределением вероятностей определенных ориентаций внутри отдельных групп центров. Изменение электронной энергии нижнего подуровня возбужденного состояния для различных ориентаций центра, а также поляризационного отношения ФЛ, вызванной переходами с этих подуровней в основное состояние ( $r_j$ ), в зависимости от параметров одноосного сжатия представлено на рис. 3.



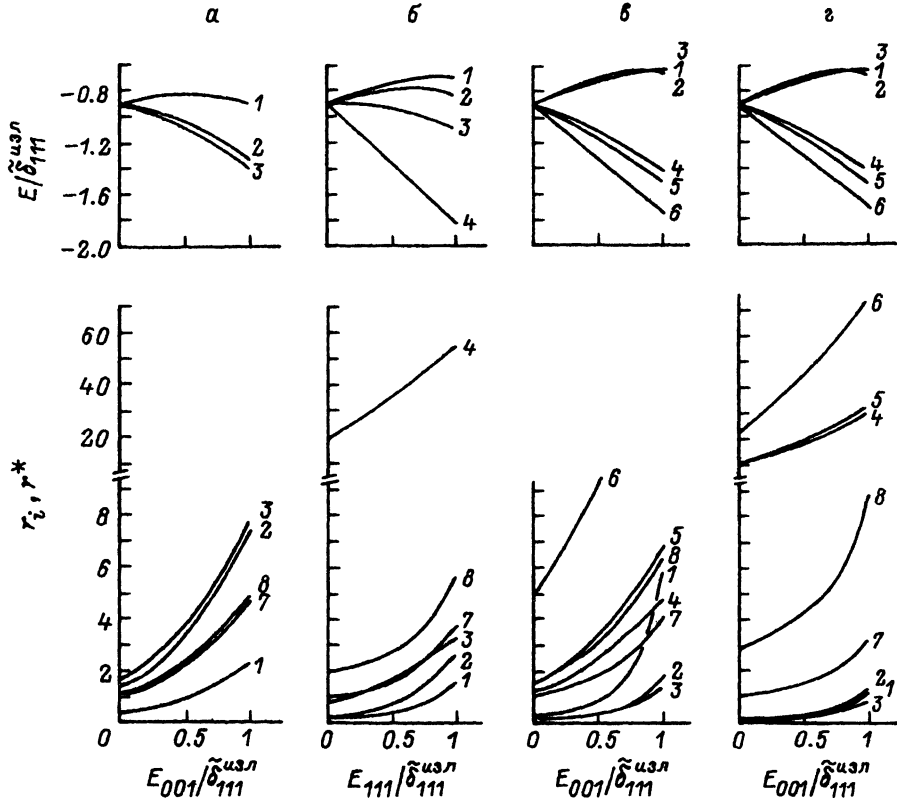


Рис. 3. Зависимости энергии излучающего состояния различно ориентированных центров и поляризационного отношения  $r_i$  ФЛ, вызванной переходами с этих состояний, от параметра одноосного сжатия.

Направление внешнего давления:  $a$  — [001],  $б$  — [111],  $в$ ,  $г$  — [110]; направление наблюдения ФЛ:  $в$  —  $[1\bar{1}0]$ ,  $г$  — [001]. Значения параметров модели в относительных единицах:  $\delta_{111}^{изл} = 1$ ,  $\delta_{111}^{изл} = -0.2$ ,  $\delta_{001}^{изл} = -0.5$ ,  $\Delta c_0 = 1.1$ . 1—6 соответствуют уровням 1—6 на рис. 2; 7—8 — интегральное поляризационное отношение  $r^*$  без выстраивания (8) и с выстраиванием при  $T \rightarrow 0$  (7). Зависимости при  $P \parallel [110]$  приведены для случая  $d/b = 2\sqrt{3}c_{44}/(c_{11} - c_{12})$ .

Значения параметров модели, при которых проведены вычисления, соответствуют величинам, дающим совпадение расчетных и экспериментальных ПД. На рис. 3 приведены также зависимости интегрального поляризационного отношения как в случае выстраивания центров при  $T \rightarrow 0$ , так и в случае его отсутствия. Видно, что при выбранных параметрах модели изменение  $r^*$  вследствие выстраивания из-за давления, параллельного оси [111] или [110], заметно превышает это изменение для  $P \parallel [001]$ . Кроме того, разность энергий между перестраивающимися ориентациями в последнем случае значительно меньше, чем в первых двух, что может обеспечить затяжной характер выстраивания центров с ростом давления при  $P \parallel [001]$  и  $T \neq 0$ .

На рис. 1 в качестве примера аппроксимации приведены вычисленные зависимости  $r^*(P)$  для двух наборов параметров модели при  $T = 6^3$  и 77 К. Видно, что расчетные кривые отражают основные особенности зависимостей  $r^*(P)$ , наблюдаемые в эксперименте при различных температурах и направлениях

<sup>3</sup> Температура 6 К выбрана для лучшего совпадения с экспериментом при малых давлениях. Отличие этой величины от температуры измерений (2 К) можно объяснить существованием в кристалле случайных электрических и деформационных полей, приводящих к дополнительному расщеплению уровней.

внешнего давления. При  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  расчеты воспроизводят резкий рост  $r^*$  в области низких давлений с последующим насыщением в случае  $T = 6$  К и плавный рост этой величины с ростом  $P$  при  $T = 77$  К. В то же время при  $P \parallel [001]$  существует лишь слабое различие кривых  $r^*(P)$  для 6 и 77 К. Кроме того, как и в эксперименте, наибольшее и наименьшее значение  $r^*$  наблюдается соответственно при  $P \parallel [110]$  (наблюдение ФЛ в направлении  $[001]$ ) и  $P \parallel [001]$ , а характер изменения  $r^*$  в области «насыщения» близок к линейному. При этом параметры расщепления уровней из-за спин-орбитального взаимодействия и внутренних искажений в излучающем состоянии при соответствующем выборе параметров внутренних искажений поглощающего состояния ( $\delta_{111}^{\text{полгл}} = 24$ ,  $\delta_{111}^{\text{полгл}} = -5$ ,  $\delta_{001}^{\text{полгл}} = -12$  и  $\delta_{111}^{\text{полгл}} = 25$ ,  $\delta_{111}^{\text{полгл}} = -90$ ,  $\delta_{001}^{\text{полгл}} = -20$  мэВ соответственно для параметров, описывающих кривые 3, 4 и 5, 6 на рис. 1) обеспечивают ПД, совпадающие с наблюдаемыми в [2].

Оценим диапазон возможных значений параметров модели, характеризующих излучающее состояние. Прежде всего отметим, что, как показывают расчеты, параметр  $\delta_{111}^{\text{изл}}$  по абсолютной величине не должен превышать параметр  $\delta_{111}^{\text{изл}}$ , иначе при  $T \rightarrow 0$  скачок  $r^*$  из-за выстраивания центров для  $P \parallel [001]$  будет таким же большим, как и для  $P \parallel [111]$ ,  $P \parallel [110]$ . При  $\delta_{111}^{\text{изл}} / \delta_{111}^{\text{изл}} \rightarrow 0$  величина скачка  $r^*$ , вызванного выстраиванием при  $P \parallel [001]$ , стремится к нулю (при  $\delta_{111}^{\text{изл}} / \delta_{111}^{\text{изл}} = 0$  в этом случае не происходит и выстраивания).  $r^*$  после выстраивания для любых направлений давления максимально при  $\Delta_{\text{co}} = 0$  и  $\delta_{001}^{\text{изл}} / \delta_{111}^{\text{изл}} \rightarrow 0$  и монотонно уменьшается с ростом  $\Delta_{\text{co}}$  и отношения  $\delta_{001}^{\text{изл}} / \delta_{111}^{\text{изл}}$ . Экспериментальные величины скачков  $r^*$  при полном выстраивании в случаях  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  таковы, что даже при  $\Delta_{\text{co}} = 0$  для согласования расчетов с экспериментами необходимо полагать, что  $|\delta_{001}^{\text{изл}}| / |\delta_{111}^{\text{изл}}| < 2$ . Аппроксимация ПД, как уже говорилось, накладывает более жесткое условие (4) на относительную величину параметра  $\delta_{001}^{\text{изл}}$ . Таким образом, соотношения параметров расщепления при излучении в рассматриваемой модели могут быть следующими:  $|\delta_{111}^{\text{изл}}| < |\delta_{111}^{\text{изл}}|$ ,  $10.2\delta_{111}^{\text{изл}} \leq \leq |\delta_{001}^{\text{изл}}| \leq |\delta_{111}^{\text{изл}}|$ .

С учетом этих соотношений при различных значениях  $\Delta_{\text{co}}$  были проведены расчеты  $r^*$  в зависимости от величины параметров расщепления (5), (6), характеризующих внешнюю деформацию. Пример результатов вычислений приведен на рис. 3.

Как можно заключить из сопоставления подобных расчетов с экспериментальными данными, представленными на рис. 1, относительно низкая величина приращения  $r^*$  с ростом  $P$  в случае полного выстраивания центров (при  $P \parallel [111]$  или  $P \parallel [110]$  и  $T = 2$  К) или в случае практического отсутствия выстраивания (при  $P \parallel [001]$  и  $T = 77$  К) свидетельствует о том, что  $E_{J_{mn}} / \delta_{111}^{\text{изл}} \ll 1$ . В этой области давлений (или  $E_{J_{mn}}$ ) при полном выстраивании центров или его полном отсутствии величина  $r^*$  растет линейно с увеличением  $P$ , и скорость этого роста для различных направлений давления определяется отношением  $b/\delta_{111}^{\text{изл}}$  и  $d/\delta_{111}^{\text{изл}}$ . В пределах погрешности оценок  $r^*$  из эксперимента ( $\Delta r^* / r^* \approx 10\%$ ) было получено, что  $|b/\delta_{111}^{\text{изл}}| = 8 \pm 2$ ,  $|d/\delta_{111}^{\text{изл}}| = 20 \pm 15$ . Кроме того, константы  $b$  и  $d$  определяют разность энергий переориентирующихся состояний при  $P \neq 0$ . Следовательно, они могут быть оценены из сравнения величины  $r^*(P)$  при полном выстраивании центров ( $T = 2$  К,  $P > 1$  кбар,  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$ ) и частичном выстраивании, которое для  $P \parallel [111]$  и  $P \parallel [110]$  существует при  $T = 77$  К из-за бальмановского расщепления центров по двум возможным ориентациям.<sup>4</sup> Такие оценки дают  $d =$

<sup>4</sup> При  $P \parallel [001]$ , как видно из рис. 1, полного выстраивания, по-видимому, не достигается даже при  $T = 2$  К,  $P \leq 7.5$  кбар.

=  $-(2.5 \pm 1.5)$  эВ,  $b \approx -1$  эВ [диапазон возможных значений  $-(0.2 \div 4)$  эВ] и, следовательно,  $\delta_{111}^{xyz} \approx 120$  мэВ ( $30 \div 800$  мэВ). При этом расщепление двух нижних подуровней возбужденного состояния составляет  $\sim 200$  мэВ (диапазон возможных значений  $50 \div 1300$  мэВ).

**Заключение.** Как показывает представленный выше анализ, особенности поведения полосы ФЛ с максимумом вблизи энергии фотонов 1.2 эВ в GaAs:Te в условиях резонансного поляризованного возбуждения или одноосных деформаций кристалла могут быть поняты при следующих предположениях. Искажение  $T_d$ -симметрии кристалла в месте расположения центра, вызывающего эту ФЛ, может быть представлено как суперпозиция трех искажений вдоль главных кристаллографических осей, не лежащих в одной плоскости. Два из них, направленные вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  и оси  $\langle 111 \rangle$ , при температурах экспериментов ( $T \leq 77$  К) являются фиксированными для каждого центра и задают плоскость фиксированных искажений типа  $\{110\}$ . Третье искажение понижает симметрию центра от моноклинной до триклинной и в каждом отдельном центре может переориентироваться, принимая направление вдоль одной из двух эквивалентных осей типа  $\langle 111 \rangle$ , лежащих в плоскости, перпендикулярной плоскости фиксированных искажений. Время переориентации этого искажения мало по сравнению с временем жизни возбужденного состояния, что приводит к установлению термического равновесия между двумя возможными ориентациями каждого центра и к выстраиванию центров при одноосных давлениях.

Представляя эти внутренние искажения аналогично искажениям, вызванным внешними деформациями, направленными вдоль тех же осей, можно при определенных параметрах центра получить достаточно хорошее согласие расчетных и экспериментальных зависимостей. При этом вычисленные ПД практически не отличаются от полученных в эксперименте, а вычисленные зависимости интегрального поляризационного отношения ФЛ от величины давления воспроизводят особенности экспериментальных кривых, хотя и не совпадают с ними. Наблюдающееся небольшое количественное расхождение экспериментальных и расчетных величин  $r^*(P)$ , возможно, связано с упрощенным характером рассматриваемой модели. К таким упрощениям могут относиться рассмотрение индуцируемых давлением изменений электронной энергии и электронной волновой функции только при искажениях центра, соответствующих минимуму адиабатического потенциала, и отсутствие учета изменения давлением формы адиабатических потенциалов. Отметим, что близкие к наблюдавшимся в экспериментах зависимости можно получить также, если в качестве направлений фиксированных искажений взять другую пару осей, лежащих в той же плоскости типа  $\{110\}$  (например,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$ ).

Существенной особенностью предложенной модели по сравнению с ранее рассмотренной [2, 3] является введение переориентирующегося искажения, благодаря которому удается объяснить полученные в настоящей работе экспериментальные зависимости  $r(P)$  во всем исследованном диапазоне величин одноосных давлений от 0 до 10 кбар при температурах 2 и 77 К, тогда как расчеты, проведенные в модели, не учитывая переориентации, могли дать результаты, с той же точностью совпадающие с экспериментальными значениями  $r$  только в области больших давлений [3]. Отметим также, что в рассматриваемой нами модели в принципе возможна рекомбинационно-стимулированная переориентация и других искажений, которые полагаются фиксированными. Однако для соответствия экспериментальным данным необходимо, чтобы такая переориентация происходила только при межзонном возбуждении ФЛ и, кроме того, давала лишь слабое выстраивание при одноосных давлениях, дабы заметно не изменить равновесность распределения центров по всем возможным фиксированным искажениям вдоль направлений типа  $\langle 001 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ .

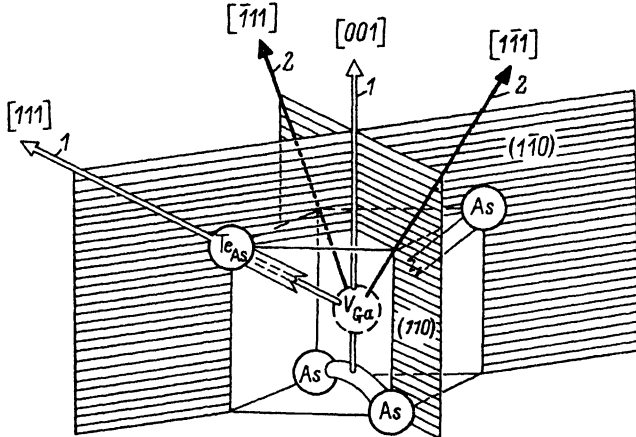


Рис. 4. Пространственная модель центра  $V_{Ga}Te_{As}$  в  $GaAs:Te$ .

Стрелками показаны оси фиксированных (1) и переориентирующегося (2) внутренних искажений центра.

Поскольку рассматриваемый нами центр отождествляется с комплексом, содержащим  $V_{Ga}$  и  $Te_{As}$ , находящиеся в соседних узлах решетки [<sup>1, 4-7</sup>], фиксированное искажение вдоль оси  $\langle 111 \rangle$  можно связать с осью указанной пары дефектов. Это искажение вместе с другим фиксированным искажением (вдоль оси  $\langle 001 \rangle$ ) задает плоскость фиксированных искажений типа  $\{110\}$ , которая, если не принимать во внимание переориентирующееся искажение, представляет собой плоскость симметрии центра (рис. 4). В таком приближении симметрия рассматриваемого комплекса моноклинна и подобна симметрии комплекса, состоящего из расположенных в соседних узлах вакансии и донора в  $Si$  [<sup>8-10</sup>]. Понижение симметрии комплекса в  $Si$  обусловлено эффектом Яна—Теллера и соответствует образованию двумя электронами связи между двумя из трех ближайших к  $V_{Si}$  атомов  $Si$  [<sup>8-10</sup>]. Можно предположить, что подобное явление при определенных зарядовых состояниях комплекса или в случае его возбуждения существует и для пары  $V_{Ga}Te_{As}$ , приводя к фиксированному искажению комплекса вдоль оси  $\langle 001 \rangle$ , понижающему исходную тригональную симметрию пары до моноклинной. Отличие исследуемого комплекса  $V_{Ga}Te_{As}$  в  $GaAs$  от комплекса донор—вакансия в  $Si$  состоит в существовании третьего (переориентирующегося) искажения, понижающего его симметрию до триклинной (рис. 4).

Возможность существования двух, не связанных с осью пары  $V_{Ga}Te_{As}$  искажений рассматриваемого комплекса, по-видимому, может быть понята из аналогии  $V_{Ga}$  в  $GaAs$  с  $V_{Si}$  в  $Si$ . Как известно [<sup>11</sup>], вакансии в кремнии в зависимости от своего зарядового состояния может быть искажена из-за эффекта Яна—Теллера вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  ( $V_{Si}^0$ ) или одновременно вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  и оси  $\langle 111 \rangle$  ( $V_{Si}^-$  и  $V_{Si}^{2-}$ ).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Буянова И. А., Остапенко С. С., Шейнкман М. К. // ФТТ. 1985. Т. 27. В. 3. С. 748—755.
- [2] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Рещиков М. А., Седов В. Е., Сосновский В. Р. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 3. С. 50—57.
- [3] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Рещиков М. А., Седов В. Е., Сосновский В. Р. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 3. С. 58—66.
- [4] Williams E. W. // Phys. Rev. 1968. V. 168. N 3. P. 922—928.
- [5] Hwang C. J. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 11. P. 4584—4590.
- [6] Hurlle D. T. J. // J. Phys. Chem. Sol. 1979. V. 40. N 8 P. 627—637.

- [7] Chiang S. Y., Pearson G. L. // J. Lumm. 1975. V. 10. N 5. P. 313—322.  
[8] Watkins G. D., Corbett J. W. // Phys. Rev. 1964. V. 134. N 5A. P. A1359—A1377.  
[9] Elkin E. L., Watkins G. D. // Phys. Rev. 1968. V. 174. N 3. P. 881—897.  
[10] Fan X.-Q., Shen S.-G., Zhang D.-X. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 15 P. 9501—9507.  
[11] Bourgoin J., Lannoo M. // Point Defects in Semiconductors: II, Experimental Aspects. Berlin, 1983. (Springer Series in Solid State Sciences. V. 35).

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе РАН  
Санкт-Петербург

Получена 17.12.1991  
Принята к печати 11.02.1992

