

О ПОЛЯРИЗАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

Р. А. Варданян, Г. Г. Киракосян

Как известно, дислокации оказывают существенное влияние на оптические свойства полупроводников, что проявляется как в спектрах поглощения, так и люминесценции [1, 2]. Мы рассмотрим излучательный переход электрона из зоны проводимости в связанное состояние, порождаемое дислокацией в запрещенной зоне. Волновая функция конечного состояния ψ_f , описывающая локализацию электрона в плоскости (ρ, φ) , перпендикулярной оси дислокации z , за счет двумерного изотропного короткодействующего потенциала, моделирующего средство электрона с ненасыщенными связями краевой дислокации, а также эффект автолокализации вдоль z из-за сильного взаимодействия с акустическими фононами (акустический полярон) [3, 4], имеет вид

$$\psi_f(\rho, \varphi, z) = (\gamma/2)^{1/2} C(m) K_m(\beta_m \rho) \exp(im\varphi) \text{ch}^{-1}(\gamma z), \quad \rho > a, \quad (1)$$

$$\beta_m = (2\mu E_{D|m|} / \hbar^2)^{1/2}, \quad \gamma = \frac{1}{16} \frac{\mu \lambda^2}{G a^2 \hbar^2} \ln^{-1}(1/\beta a),$$

$E_{D|m|}$ — энергия поперечного связывания, λ — константа деформационного потенциала, G — упругий модуль, μ — эффективная масса, a — постоянная решетки, $K_m(x)$ — функция Макдональда, m — магнитное квантовое число. Здесь, как и в работе [5], мы рассматриваем переход в конденсированное состояние, сформированное из пакета волн с волновыми векторами у дна дислокационной зоны. Если пакет сформирован из состояний у потолка зоны, то в качестве оператора кинетической энергии в уравнении Шредингера следует использовать $E^0 + (\hbar^2/2\mu) \Delta$ (E^0 — ширина дислокационной зоны). В этом случае стационарное конденсированное состояние не возникает (в энергетическом функционале как конденсированный потенциал, так и $(\hbar^2/2\mu) \Delta$ понижают энергию, не давая экстремума по радиусу состояния).

Квазиклассическая волновая функция начального состояния ψ_i электрона в электростатическом поле дислокации $U(\rho) = U_0 \ln(\rho_D/\rho)$, где $U_0 = 2e^2 f(T)/\chi a$, χ — диэлектрическая постоянная, $f(T)$ — температурно-зависимый коэффициент заполнения дислокации, ρ_D — радиус экранирования, приведена в работе [6].

В приближении Франка—Кондона вероятность многофононного перехода с испусканием света частоты Ω в интервале $d\Omega$, сопровождающегося поляризацией решетки в конечном состоянии, имеет вид [7]

$$d\omega = (2\pi/\hbar) \langle |M_{if}(\Omega)|^2 G(\Omega - \omega_{if}) \rangle d\Omega, \quad (2)$$

где

$$M_{if}(\Omega) = \frac{e}{\mu c} \left(\frac{8e^2 \Omega}{\pi \chi \mu^2 c^3} \right)^{1/2} \int \psi_f^*(e\nabla) \psi_i d^2\rho dz \quad (3)$$

— электронный матричный элемент в дипольном приближении, e — вектор поляризации света, $G(x)$ — спектральная функция многофононного перехода, ω_{if} — разность энергий начального и конечного состояний. Угловые скобки в (2) означают усреднение по начальным и суммирование по конечным электронным состояниям.

Ограничимся рассмотрением перехода из начального состояния с магнитным квантовым числом $m_i = 0$ (вероятность туннелирования частиц с $m_i \neq 0$ на дислокацию существенно меньше из-за отталкивающего центробежного потенциала). Свойства симметрии подынтегрального выражения в (3) приводят к правилам отбора $\Delta m = m_i - m_f = 0, \pm 1$; $\Delta m = 0$ соответ-

ствует излучению поляризованному вдоль оси дислокации, а $\Delta m = \pm 1$ правой и левой поляризации в плоскости, перпендикулярной ей.

В рассматриваемом нами случае сильной электрон-фононной связи функция формы спектра является гауссовой [7]

$$G(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp[-(x - \Delta)^2/2\sigma^2]. \quad (4)$$

Подставляя матричный элемент перехода с $m_f = \pm 1$ ($e \perp z$) в (2), после выполнения простых выкладок с учетом $C(1) = \beta_1 [2\pi \ln(1/\beta_1 a)]^{-1/2}$ находим

$$d\omega = \omega_0 \frac{\exp[-F(E_n)]}{\sqrt{|F''(E_n)|}} \exp\left[-\frac{(E^* - \hbar\Omega)^2}{2\sigma^2}\right] d\Omega, \quad (5)$$

где

$$\omega_0 = \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2 n}{\mu^2 c^2 \gamma} \left(\frac{U_0}{E_D}\right)^{1/2} \frac{\hbar\Omega}{\sigma T} \ln^{-1}(1/\beta_1 a) \left[\ln \frac{\rho_D}{a} - \frac{E_n}{U_0}\right]^{1/2} \left[1 + \frac{T(E^* + E_n - \hbar\Omega)}{\sigma^2}\right]^{-1/2},$$

n — концентрация носителей в зоне,

$$F(E) = 2 \frac{(2\mu U_0)^{1/2}}{\hbar} \rho_D \gamma \left[\frac{3}{2}; \ln \frac{\rho_D}{a} - \frac{E_n}{U_0}\right] \exp(-E_n/U_0) + \left(\frac{1}{T} + \frac{E^* - \hbar\Omega}{\sigma^2}\right) E + \frac{E^{*2}}{2\sigma^2}.$$

Перевальное значение E_n определяется из уравнения

$$\frac{U_0}{T} + \frac{U_0(E^* + E_n - \hbar\Omega)}{\sigma^2} = \frac{(2\mu U_0)^{1/2}}{\hbar} \rho_D \gamma \left[\frac{1}{2}; \ln \frac{\rho_D}{a} - \frac{E_n}{U_0}\right] \exp(-E_n/U_0), \quad (6)$$

в котором $E^* = E_{D1} - \Delta$. Дисперсия σ и тепловыделение Δ (параметр стоксовых потерь) обычным образом определяются волновой функцией локализованного состояния [5]

$$\Delta = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{3\mu}, \quad \sigma^2 = \Delta \begin{cases} 2T, & T > \hbar\omega_D, \\ \hbar\omega_D, & (\delta\mu s^2 E_D)^{1/2} < T < \hbar\omega_D, \end{cases} \quad (7)$$

ω_D — дебаевская частота, s — скорость звука. Согласно (5), частотная зависимость спектра люминесценции с экспоненциальной точностью дается гауссовой кривой. Дисперсия σ определяет температурное уширение спектра, обусловленное электрон-фононным взаимодействием, а стоксовы потери Δ — сдвиг максимума люминесценции относительно бесфононной линии.

Вероятность перехода с испусканием линейно-поляризованного вдоль оси z света отличается от выражения (5) множителем $(T/U_0) [\ln(\rho_D/a) - E_n/U_0]^{-1} [1 + T(E^* + E_n - \hbar\Omega/\sigma^2)]^{-1}$, который много меньше единицы в силу условия применимости квазиклассики. Таким образом, в рассмотренной нами модели излучательный захват электрона из зоны проводимости на дислокацию характеризуется существенной поляризационной анизотропией. Преимущественный вклад в люминесценцию поперечно-поляризованного излучения связан с эффективностью прохождения электростатического барьера дислокации электронами с малыми значениями компонент квазимульса, перпендикулярных полю. Полученная поляризационная анизотропия дислокационной люминесценции экспериментально наблюдалась в работе [2]. Заметим, что ввиду аксиальной симметрии системы спектр люминесценции должен быть двукратно вырожден, соответствуя двум противоположным круговым поляризациям. Расщепление спектра, связанное со снятием вырождения на фоне широкого гауссовского уширения, экспериментально может быть разрешено в области низких температур в достаточно сильных магнитных полях с напряженностью ≥ 10 кЭ.

Авторы признательны С. В. Иорданскому, В. Я. Кравченко и Ю. А. Осипьяну за обсуждение полученных результатов.

- [1] Баженов А. В., Осипьян Ю. А., Штейнман Э. А. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 2. С. 389—394.
 [2] Баженов А. В., Красильникова Л. Л. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 2. С. 590—593.
 [3] Рашба Э. И. // ЖОС. 1957. Т. 2. № 1. С. 75—87.
 [4] Воронов В. П., Косевич А. М. // ФНТ. 1979. Т. 76. № 3. С. 371—375.
 [5] Варданын Р. А., Киракосян Г. Г., Кравченко В. Я. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3565—3570.
 [6] Варданын Р. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 6. С. 2241—2248.
 [7] Перлин Ю. Е. // УФН. 1963. Т. 80. № 4. С. 553—595.

Институт физики твердого тела АН СССР
 Черноголовка
 Московская область

Поступило в Редакцию
 20 июня 1988 г.
 В окончательной редакции
 28 ноября 1988 г.

Физика твердого тела, том 31, в. 3, 1989

Solid State Physics, vol. 31, № 3, 1989

УДК 539.2

ЛОКАЛЬНАЯ ДИНАМИКА ТИТАНАТА БАРИЯ С ДЕФЕКТАМИ

М. В. Клопов, Н. Н. Кристофель

В настоящем сообщении приведены результаты расчета локальной динамики дефектов замещения в сегнетоэлектрическом кристалле BaTiO_3 , аналогичного проведенному для SrTiO_3 [1]. Динамика совершенного титаната бария изучена достаточно хорошо [2-6]. Фазовый переход типа смещения ($T_c = 120^\circ\text{C}$) связан здесь с мягкой модой симметрии F_{1u} в центре зоны Бриллюэна. Поэтому можно ожидать специфических температурных эффектов в локальной динамике дефектов в BaTiO_3 , особенно для F_{1u} колебаний.

Методика описания идеальной и возмущенной динамики кристалла изложена в [1]. В качестве исходных параметров простой оболочечной модели использовались данные [1] при $T = 260\text{ K}$, которые обрабатывались методом наименьших квадратов так, чтобы температурно-зависимые параметры для BaTiO_3 давали поведение мягкой моды, совпадающее с наблюдаемым. Остальные колебательные ветви зависят при этом от температуры весьма слабо. В отличие от SrTiO_3 для BaTiO_3 оказалось достаточным варьировать только эффективные ионные заряды. При 430 K $Z(\text{Ti}) = 4.677$, уменьшаясь немного с температурой, а $Z(\text{Ba}) = 1.585$ немного возрастает с температурой (расчеты велись до 700 K). Заряд кислорода определяется нейтральностью ячейки. Значения безразмерных электронных av^{-1} и короткодействующих поляризуемостей dv^{-1} , центральных \bar{A} и нецентральных \bar{B} силовых постоянных короткодействующего отталкивания (единицы $e^2/2v$) даны в таблице.

	Ti	Ba	O
av^{-1}	0.0023	0.0398	0.0284
dv^{-1}	0.0112	-0.5724	0.8985
	Ba-O	Ti-O	O-O
\bar{A}	22.77	328.7	2.033
\bar{B}	0.1961	-71.82	1.826