

Оптические характеристики комплексов, связанных с 1.18 эВ полосой люминесценции в n -GaAs : Sn(Si): результаты исследований фотолюминесценции при поляризованном резонансном возбуждении

© А.А. Гуткин, Т. Пиотровский*, Е. Пулторак*, М.А. Решиков, В.Е. Седов

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

* Институт электронной технологии,
02-668 Варшава, Польша

(Получена 14 июля 1997 г. Принята к печати 14 июля 1997 г.)

Экспериментальные значения поляризации низкотемпературного излучения комплексов $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$ в n -GaAs при резонансном возбуждении поляризованным светом, распространяющимся вдоль кристаллографического направления [110] и [100], сопоставлены с выражениями, полученными в классическом дипольном приближении для дефектов триклинной и моноклинной симметрии. Показано, что доля ротатора в суперпозиции ротатора и осциллятора, представляющей излучение комплекса, составляет $17 \div 18\%$. Направление оси этих диполей, удовлетворяющее экспериментальным данным, согласуется с предположением, что влияние донора на вакансионные орбитали дырки, локализованной на комплексе, меньше, чем влияние эффекта Яна–Теллера. При этом симметрия комплекса может быть как моноклинной, так и триклинной. В обоих случаях отклонение оси оптического диполя комплекса от направления оси диполя изолированной V_{Ga} , искаженной вследствие эффекта Яна–Теллера, для комплексов $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$ меньше, чем для комплексов $V_{Ga}Te_{As}$. Последнее означает, что влияние донора на электронную структуру комплекса в $V_{Ga}Te_{As}$ больше, чем в $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$. Это согласуется с различием в положении донора в этих комплексах.

1. Введение

Известно, что полоса фотолюминесценции (ФЛ) с максимумом вблизи 1.2 эВ в n -GaAs, связываемая с комплексами вакансии галлия (V_{Ga}) — донор (D) [1,2], может быть возбуждена резонансно, т.е. за счет оптических переходов электронов с комплексов в зону проводимости или на уровни, лежащие вблизи ее дна [3–6]. Качественные закономерности поляризации этой полосы в случае, если свет, вызывающий такие переходы, поляризован, привели к заключению, что симметрия дефектов, вызывающих ее появление в GaAs, легированном Te, Sn или Si, не выше моноклинной [4–6]. Более детальный количественный анализ результатов измерений этой поляризации выполнен только для GaAs:Te [7]. В настоящей работе такой анализ, позволяющий сделать выводы о степени соответствия феноменологической модели, рассмотренной в [6], свойствам дефектов и оценить их некоторые параметры, проведен для комплексов $V_{Ga}D_{Ga}$ в GaAs:Sn и GaAs:Si, отличающихся от комплексов в GaAs:Te положением донора. Результаты исследования дефектов в материалах с различными донорами сопоставлены друг с другом.

2. Дисторсии комплексов $V_{Ga}D_{Ga}$

Исходное положение компонент комплекса (V_{Ga} и D_{Ga}) в узлах неискаженной решетки GaAs отвечает моноклинной симметрии дефекта и может характеризоваться направлением оси типа $\langle 110 \rangle$, соединяющей эти компоненты. Однако, согласно модели, рассмотренной в работе [6], по крайней мере в излучающем состоянии

комплекса, позиции его компонент и (или) окружающих их атомов смещены из узлов решетки в идеальном кристалле благодаря существованию искажения, связанного с ян-теллеровской дисторсией V_{Ga} . Последняя вызвана взаимодействием дырки, локализованной в излучающем состоянии комплекса на вакансионной орбитали, с F_2 -модой неполносимметричных колебаний окружающих V_{Ga} атомов As. Для изолированной V_{Ga} такое взаимодействие приводит к тригональной симметрии исходно тетраэдрической квазимолекулы $V_{Ga}As_4$ и дает 4 эквивалентных конфигурации с различными направлениями тригональной оси типа $\langle 111 \rangle$. Для качественного сопоставления с экспериментальными данными в [6] предполагалось, что расщепление состояний V_{Ga} в тетраэдрическом кристаллическом поле превышает их расщепление из-за ян-теллеровского взаимодействия и влияния донора. В этом случае гамильтониан, описывающий взаимодействие с F_2 -модой и влияние донора, в базисе волновых функций типа Z, Y, X имеет вид [6]

$$H = d' \begin{pmatrix} 0 & Q_4 & Q_5 \\ Q_4 & 0 & Q_6 \\ Q_5 & Q_6 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta^* & (\alpha - \frac{\beta}{2}) & (\alpha - \frac{\beta}{2}) \\ (\alpha - \frac{\beta}{2}) & -\frac{\beta^*}{2} & (\alpha + \beta) \\ (\alpha - \frac{\beta}{2}) & (\alpha + \beta) & -\frac{\beta^*}{2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где d' — константа связи между дыркой и F_2 -колебаниями; Q_4, Q_5, Q_6 — нормальные координаты, описывающие эти колебания и преобразующиеся соответственно как X, Y, Z ; α, β и β^* — параметры, описывающие влияние донора.

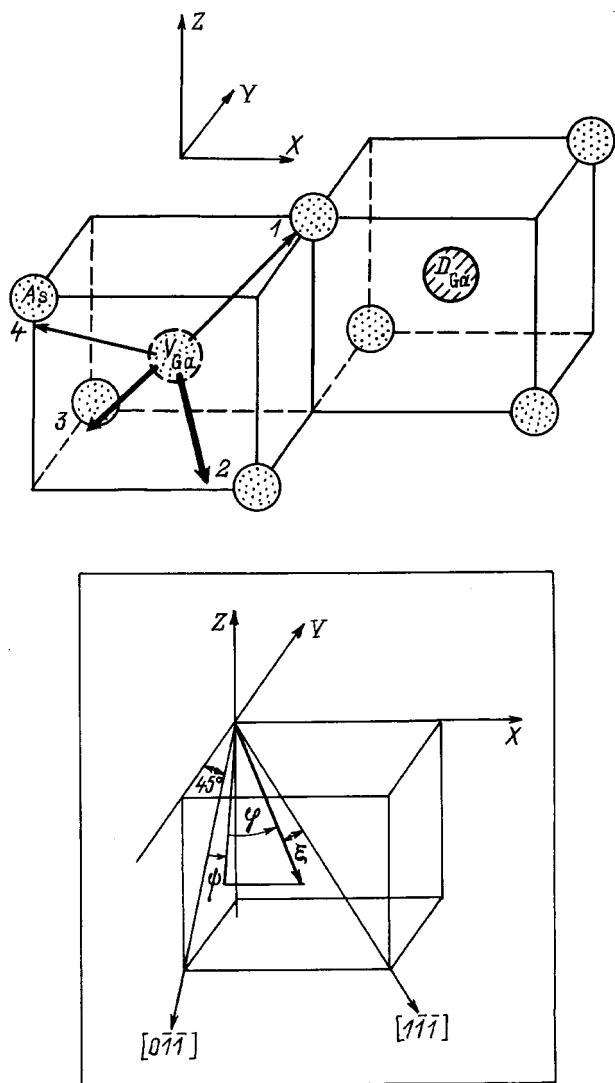


Рис. 1. Схематическое изображение дисторсий комплекса $V_{Ga}D_{Ga}$. $1 \div 4$ — номера атомов As, окружающих V_{Ga} . Стрелками показаны направления сдвига V_{Ga} в конфигурациях $1 \div 4$. X, Y, Z — система координат, по которой преобразуются Q_4, Q_5, Q_6 . На вставке показан пример отсчета углов φ, ψ и ξ для оптического диполя комплекса в конфигурации 2.

Можно считать, что влияние донора на вакансионные орбитали меньше, чем взаимодействие с F_2 -модой, как это имеет место для комплексов $V_{Ga}Te_{As}$ в GaAs (см., например [7]). Этот вывод следует из ряда экспериментальных данных, в частности, из отсутствия видимого выстраивания дисторсий в случае одноосных давлений до 10 кбар вдоль направления [100] [6,8], а также из близости положений полос ФЛ для комплексов, включающих различные доноры ($Te_{As}, Sn_{Ga}, Si_{Ga}, S_{As}$), в то время как энергия ян-теллеровской стабилизации для $V_{Ga}Te_{As}$ превышает 200 мэВ [7].

В соответствии с этим в 1-м порядке теории возмущений влияние донора при образовании комплекса $V_{Ga}D_{Ga}$ приводит к некоторому изменению смещений

атомов квазимолекулы $V_{Ga}As_4$ и энергий ранее эквивалентных конфигураций этой молекулы [6]. Соответствующие этим конфигурациям направления результирующего сдвига V_{Ga} в комплексе показаны стрелками на рис. 1.

Ян-теллеровские конфигурации 2 и 3 (рис. 1), в которых дырка локализована в основном на оборванных связях атомов 2 или 3, исходно расположенных симметрично относительно донора, эквивалентны. Если они имеют наименьшую энергию, то приложение к кристаллу небольшого одноосного давления вдоль направления [111] в условиях низких температур должно привести к нарушению эквивалентности этих конфигураций в части комплексов и их неравномерному заселению (выстраивание дисторсий). Последнее должно вызвать ступенчатое изменение поляризации ФЛ в случае приложения одноосного давления при низких температурах. Поскольку подобный эффект наблюдался экспериментально при возбуждении комплексов за счет генерации электронно-дырочных пар и последующего захвата дырок на комплексы (см., например, [6]), ранее предполагалось, что указанные конфигурации комплекса имеют наименьшую энергию [6,8]. Это соответствует $\beta \geq 0, \alpha > -\beta/4$ в гамма-миллиониане (1) и триклинной симметрии комплекса [6]. Однако такая ситуация возможна только в тех случаях, когда потенциал остова донора имеет минимум вблизи атомов 2 и 3 или может быть аппроксимирован потенциалом нулевого радиуса (δ -образным потенциалом) [9]. Причины, которые могли бы вызвать подобное поведение потенциала, неясны.

Более естественно предположить, что отталкивающий дырку потенциал остова донора монотонно убывает с расстоянием. В этом случае наименьшую энергию при нулевой внешней деформации имеет только одна конфигурация, соответствующая локализации дырки на оборванной связи наиболее удаленного от донора атома 4 (рис. 1), что соответствует $\beta < 0, \alpha > \beta/2$ и моноклинной симметрии комплекса [6]. Из-за отсутствия в комплексе эквивалентных конфигураций с наименьшей энергией изменение направления дисторсии в определенных группах комплексов под влиянием одноосного давления возможно только тогда, когда это давление компенсирует повышение энергии других конфигураций под влиянием донора. С таким выстраиванием дисторсий комплексов $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$ может быть связано ступенчатое возрастание поляризации полосы их ФЛ при температуре 2 К и давлении ~ 5 кбар в направлении [111] [6]. Скачок поляризации этой полосы ФЛ вблизи нулевых давлений [6] в этом случае должен быть приписан неконтролируемым дефектам, обладающим близкими оптическими свойствами¹. Однако прямые экспериментальные свидетельства, позволяющие сделать выбор между двумя вариантами модели, в настоящее время отсутствуют. В связи с этим

¹ Авторы выражают благодарность проф. Дж.Д. Уоткинсу, предложившему такое объяснение и указавшему, что во многих близких парах вакансия-донор в полупроводниках $A^{III}B^{VI}$ реализуется именно рассматриваемая в этом случае конфигурация (см., работу [10] и ссылки в ней).

мы анализируем результаты измерений ФЛ комплексов при поляризованном резонансном возбуждении, учитывая обе возможности. Заметим также, что моноклиническая конфигурация 1, отвечающая локализации дырки в основном на оборванной связи ближайшего к донору атома I (рис. 1), должна иметь наибольшую энергию и поэтому вариант модели, в которой строение комплекса отвечает этой конфигурации нами не рассматривается.

Полные энергии (W_i) всех рассматриваемых конфигураций излучающего состояния комплекса, отсчитываемые от энергии исходного t_2 -состояния V_{Ga} в 1-м порядке теории возмущений, могут быть определены через параметры α и β с помощью гамильтониана (1) [6]

$$\begin{aligned} W_1 &= -E_{JT} + 2\alpha, \\ W_2 = W_3 &= -E_{JT} - \frac{2}{3}(\alpha + \beta), \\ W_4 &= -E_{JT} - \frac{2}{3}(\alpha - 2\beta). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь E_{JT} — энергия ян-теллеровской стабилизации, определяемая соотношением

$$E_{JT} = \frac{2d'^2}{3k}, \quad (3)$$

где k — коэффициент упругости F_2 -моды колебаний.

В том же приближении обобщенные координаты $Q_{i0}^{(1)}$, $Q_{i0}^{(2)}$, $Q_{i0}^{(3)}$, $Q_{i0}^{(4)}$ ($i = 4, 5, 6$), отвечающие этим конфигурациям, равны

$$\begin{aligned} Q_{40}^{(1)} &= Q_{50}^{(1)} = Q_{60}^{(1)} = -\frac{E_{JT}}{d'}, \\ Q_{40}^{(2)} &= -\frac{E_{JT}}{d'} + \frac{4\alpha + \beta}{6d'}, \quad Q_{50}^{(2)} = \frac{E_{JT}}{d'} + \frac{\alpha - 2\beta}{3d'}, \\ Q_{60}^{(2)} &= \frac{E_{JT}}{d'} + \frac{2\alpha + 5\beta}{6d'}, \\ Q_{40}^{(3)} &= Q_{50}^{(2)}, \quad Q_{50}^{(3)} = Q_{40}^{(2)}, \quad Q_{60}^{(3)} = Q_{60}^{(2)}; \\ Q_{40}^{(4)} &= Q_{50}^{(4)} = \frac{E_{JT}}{d'} + \frac{2\alpha - \beta}{6d'}, \\ Q_{60}^{(4)} &= -\frac{E_{JT}}{d'} + \frac{2\alpha - \beta}{3d'}. \end{aligned} \quad (4)$$

Проекции равновесных сдвигов вакансии из узла на оси X , Y , Z реального пространства пропорциональны соответственно Q_{40} , Q_{50} , Q_{60} . В случае, если влияние донора пренебрежимо мало ($\alpha = \beta = 0$), эти сдвиги в каждой из конфигураций происходят вдоль одного из направлений $\langle 111 \rangle$.

3. Поляризация фотолуминесценции совокупности комплексов $V_{Ga}D_{Ga}$ в GaAs

Поляризация ФЛ комплексов определялась экспериментально так же, как в [4–7], в ортогональной схеме, при которой направления возбуждающего и наблюдаемого светового потоков совпадали соответственно с кристаллографическими осями $[110]$ и $[001]$ (схема $[110]$ – $[001]$) или $[100]$ и $[010]$ (схема $[100]$ – $[010]$).

Направление электрического вектора возбуждающего света характеризовалось, как и ранее [7], углом η , отсчитываемым от оси, перпендикулярной направлениям возбуждающего и регистрируемого световых потоков. Степень наведенной поляризации ФЛ $\rho(\eta)$ определялась отношением

$$\rho(\eta) = \frac{I_{\parallel}(\eta) - I_{\perp}(\eta)}{I_{\parallel}(\eta) + I_{\perp}(\eta)}, \quad (5)$$

где $I_{\parallel}(\eta)$ и $I_{\perp}(\eta)$ — интенсивности ФЛ с электрическим вектором световой волны, параллельным и перпендикулярным оси, от которой отсчитывался угол η .

Для анализа экспериментальных данных вычислим $\rho(\eta)$ в классическом дипольном приближении, описывающем оптические свойства дефекта суперпозицией некогерентных осциллятора и ротатора [11], аналогично тому, как это было сделано для комплексов $V_{Ga}Te_{As}$ [7]. Подобные вычисления справедливы в общем случае анализируемых центров и не накладывают никаких ограничений на соотношение между эффектом Яна–Теллера и влиянием донора.

Как и в [7], мы будем предполагать, что относительные вклады ротатора (μ) и осциллятора ($1 - \mu$) в поглощение равны их вкладам в излучение, направления излучающего и поглощающего диполей совпадают (однодипольное приближение), а интенсивность возбуждения мала, так что стационарная концентрация возбужденных дефектов намного меньше концентрации дефектов с определенной ориентацией исходной оси. В настоящей работе мы будем рассматривать только случай низких температур, когда в основном состоянии комплекса реализуются только конфигурации с наименьшей энергией, а в возбужденном состоянии невозможны термическая эмиссия комплексов дырок и переориентация дисторсий. Распределение комплексов по возможным ориентациям исходной оси и конфигурациям с наименьшей энергией считалось однородным, поскольку при нерезонансном возбуждении поляризация не наблюдалась.

В этих условиях поляризация ФЛ при резонансном поляризованном возбуждении зависит от абсолютных значений направляющих косинусов (a , b , c) оси оптического диполя комплекса. Согласно [6,7], эта ось параллельна направлению сдвига V_{Ga} (рис. 1). Для каждой из конфигураций комплекса величины a , b , c будем определять в локальной системе декартовых координат, оси которых параллельны направлениям $\langle 100 \rangle$ и выбраны так, чтобы проекции смещений вакансии на эти оси в отсутствие

влияния донора были положительными (см. вставку на рис. 1). Вычисления показывают, что экстремальным значениям поляризации в обеих схемах эксперимента соответствуют значения угла η 0° и 90° . При этом для схемы [110]–[001]

$$\begin{aligned} \rho(\eta = 0) &= \rho_1 \\ &= \frac{4(a^2b^2 + a^2c^2 + b^2c^2)(1 - 2\mu)^2}{(a^2 + b^2 + 2\mu c^2)^2 + (a^2 + c^2 + 2\mu b^2)^2 + (b^2 + c^2 + 2\mu a^2)^2}, \end{aligned} \quad (6)$$

а для схемы [100]–[010]

$$\begin{aligned} \rho(\eta = 0) &= \rho_2 \\ &= \frac{[(a^2 - b^2)^2 + (a^2 - c^2)^2 + (b^2 - c^2)^2](1 - 2\mu)^2}{(a^2 + b^2 + 2\mu c^2)^2 + (a^2 + c^2 + 2\mu b^2)^2 + (b^2 + c^2 + 2\mu a^2)^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

и $\rho(\eta = 90^\circ) \equiv 0$ для обоих случаев.

Триклинным центрам отвечает условие $a \neq b \neq c$, а моноклиным — $b = c \neq a$. Как видно из выражений (6) и (7), измерение $\rho(\eta = 0)$ в двух указанных схемах эксперимента позволяет определить возможные значения μ

$$\mu = \frac{1}{2} - \frac{\pm \sqrt{(3\rho_1 + 2\rho_2)(3 - \rho_2)} - \frac{1}{2}(3\rho_1 + 2\rho_2)}{4 - \rho_1 - 2\rho_2}. \quad (8)$$

Для наглядности удобно выразить направляющие косинусы через углы φ и ψ , определяемые в той же системе координат, что и величины a, b, c для каждой из конфигураций (см. вставку на рис. 1)

$$\begin{aligned} a &= \sin \varphi, & b &= \cos \varphi \cos(45^\circ + \psi), \\ c &= \cos \varphi \sin(45^\circ + \psi). \end{aligned} \quad (9)$$

Тогда подстановка (9) в (6) и (7) дает соотношение, которому должны удовлетворять φ и ψ при известном соотношении ρ_1/ρ_2

$$\cos^2 \varphi (4 \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \cos^2 2\psi) = \frac{4 \frac{\rho_1}{\rho_2}}{3 \frac{\rho_1}{\rho_2} + 2}. \quad (10)$$

Это соотношение, как мы увидим в следующем разделе, позволяет определить область возможных значений φ и ψ .

4. Результаты экспериментов и обсуждение

Нами были исследованы образцы, вырезанные из нескольких монокристаллов *n*-GaAs. Кристаллы *n*-GaAs:Sn были выращены методом Чохральского и имели концентрацию электронов от $\sim 6 \cdot 10^{16}$ до $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Кристаллы *n*-GaAs:Si были выращены методом направленной кристаллизации и имели концентрацию электронов $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Во всех образцах

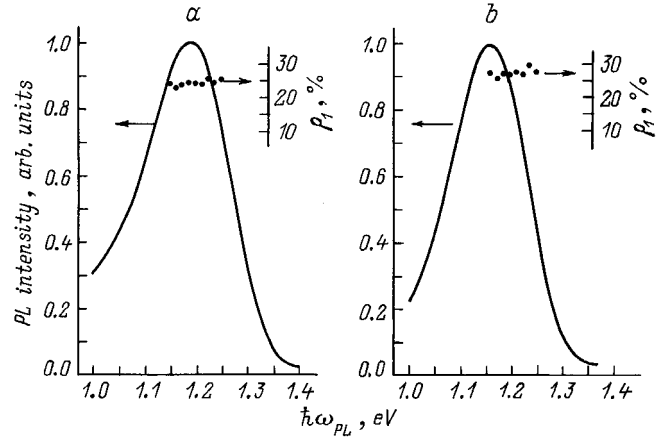


Рис. 2. Спектры фотолюминесценции и наведенной поляризации (величины ρ_1) для GaAs:Sn (a) и GaAs:Si (b). Концентрация доноров в образцах $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$. $T = 77 \text{ К}$. Энергия фотонов возбуждающего света при измерении спектров фотолюминесценции — 1.96 эВ, при измерении наведенной поляризации — 1.37 эВ.

при 77 К наблюдалась полоса ФЛ с максимумом вблизи 1.2 эВ, связываемая с комплексами $V_{\text{Ga}}D_{\text{Ga}}$. Спектры возбуждения этой полосы были подобны наблюдавшимся ранее [5,6]. Ее поляризация, индуцируемая поляризованным резонансным возбуждением, исследовалась при указанных выше ориентациях кристалла относительно возбуждающего и наблюдаемого световых потоков.

Степень поляризации $\rho(\eta = 0)$ увеличивалась от нуля при уменьшении энергии фотонов возбуждающего света ($\hbar\omega_{\text{exc}}$) от ~ 1.47 эВ и при $\hbar\omega_{\text{exc}} < 1.38$ эВ практически переставала зависеть от $\hbar\omega_{\text{exc}}$. Последнее свидетельствует о том, что при $\hbar\omega_{\text{exc}} < 1.38$ эВ имеет место только резонансное возбуждение комплексов. При этом $\rho(\eta = 90^\circ) \approx 0$, как и следовало ожидать. Распределение степени поляризации $\rho(\eta = 0)$ по полосе ФЛ для кристаллов с достаточно высокой концентрацией доноров было однородным в области $1.16 \div 1.25$ эВ, где сигнал был достаточно велик (рис. 2). Значения ρ_1 и ρ_2 , измеренные в этой области при $\hbar\omega_{\text{exc}} < 1.38$ эВ, полагались характерными для исследуемых комплексов и приведены в таблице наряду с аналогичными величинами для комплекса $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ в GaAs [7]².

Соответствующие этим экспериментальным данным значения относительного вклада ротатора в поглощение и излучение света (μ) (см. выражение (8)) составляют $16 \div 18\%$. Определяемая уравнением (10) область возможных значений углов, характеризующих направление оси оптического диполя комплекса, для указанных в таблице экспериментальных значений ρ_1/ρ_2 показана

² Для образцов *n*-GaAs:Sn с концентрацией доноров менее 10^{17} см^{-3} наблюдалась слабая зависимость ρ_1 от $\hbar\omega_{\text{PL}}$, однако величины ρ_1 при $\hbar\omega_{\text{PL}} \approx 1.2$ эВ лежали в пределах, указанных в таблице. Максимум полосы ФЛ этих образцов был сдвинут в коротковолновую сторону на ~ 20 мЭВ.

Степень поляризации ФЛ при резонансном поляризованном возбуждении комплексов вакансии–донор в *n*-GaAs и возможные значения параметров оптических диполей этих дефектов

Комплекс	ρ_1 (%)	ρ_2 (%)	ρ_1/ρ_2	μ	Возможные значения углов φ и ψ	
					триклинная модель	моноклинная модель
$V_{Ga}Sn_{Ga}$	25÷26	4.5÷5	5.4 ± 0.4	~ 0.18	$19^\circ \lesssim \varphi \lesssim 35^\circ$ $0^\circ \lesssim \psi \lesssim 18^\circ$	$\varphi \approx 19^\circ$ $\psi = 0$
$V_{Ga}Si_{Ga}$	27÷29	5÷6	5.2 ± 0.6	~ 0.17	$19^\circ \lesssim \varphi \lesssim 35^\circ$ $0^\circ \lesssim \psi \lesssim 18^\circ$	$\varphi \approx 19^\circ$ $\psi = 0$
$V_{Ga}Te_{As}$ [7]	27÷29	8÷9	3.3 ± 0.3	~ 0.16	–	$\varphi \approx 15^\circ$ $\psi = 0$

на рис. 3 как для триклинной ($\psi \neq 0$), так и для моноклинной ($\psi = 0$) конфигураций.

Для дальнейшего уточнения возможных значений φ и ψ следует учесть, что влияние эффекта Яна–Теллера на вакансионные орбитали дырки, локализованной на исследуемых комплексах, превосходит влияние донора, входящего в комплекс. Это обстоятельство позволяет для качественного анализа и оценок воспользоваться выражениями, полученными в 1-м порядке теории возмущений по величинам α/E_{JT} и β/E_{JT} (см. разд. 2). Далее мы проанализируем экспериментальные результаты в рамках каждого из двух указанных в разд. 2 вариантов строения комплекса $V_{Ga}D_{Ga}$, когда в равновесии при низких температурах реализуется либо триклинная, либо моноклинная конфигурация комплекса.

а) Комплекс триклинной симметрии

В этом случае минимальную энергию имеют конфигурации 2 и 3 и из выражений (4) следует, что

$$a = \sin \varphi \approx \left(1 - \frac{4\alpha + \beta}{6E_{JT}}\right) \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$b = \cos \varphi \cos(45^\circ + \psi) \approx \left(1 + \frac{\alpha - 2\beta}{3E_{JT}}\right) \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$c = \cos \varphi \sin(45^\circ + \psi) \approx \left(1 + \frac{2\alpha + 5\beta}{6E_{JT}}\right) \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (11)$$

где параметры α и β должны удовлетворять неравенствам [6]

$$\beta \geq 0, \quad 4\alpha + \beta > 0, \quad \alpha, \beta < E_{JT}. \quad (12)$$

Вычисления с использованием выражений (10) и (11) показывают, что условия (12) при экспериментальной величине $\rho_1/\rho_2 \approx 5.2$ удовлетворяются только в случае, если $19^\circ \lesssim \varphi \lesssim 35^\circ$ и соответствующие значения ψ (см. рис. 3) положительны. Относительные величины α/E_{JT} и β/E_{JT} , полученные путем решения различных пар уравнений (11) для указанного выше интервала значений φ , несколько отличаются друг от друга из-за приближенного характера уравнений (рис. 4).

б) Комплекс моноклинной симметрии

В этом случае минимальную энергию имеет конфигурация 4 (рис. 1), $\psi = 0$ и из выражений (4) следует,

что

$$a = \sin \varphi \approx \left(1 - \frac{2\alpha - \beta}{3E_{JT}}\right) \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$b = c = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \varphi \approx \left(1 + \frac{2\alpha - \beta}{6E_{JT}}\right) \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (13)$$

где параметры α и β должны удовлетворять неравенствам [6]

$$\beta \leq 0, \quad 2\alpha - \beta > 0, \quad \alpha, |\beta| < E_{JT}. \quad (14)$$

Выражение (10) дает $\varphi = \pm 19^\circ$ и $\varphi = \pm 54^\circ$. Условием (13) и (14) удовлетворяет только значение $\varphi = 19^\circ$. Зависимости величины параметра $(2\alpha - \beta)/(6E_{JT})$ от φ , получаемые из первого и второго уравнений (13), показаны на рис. 5. Как и в случае триклинного комплекса, эти величины при экспериментальном значении $\varphi \approx 19^\circ$ отличаются друг от друга в силу приближенности равенств (13).

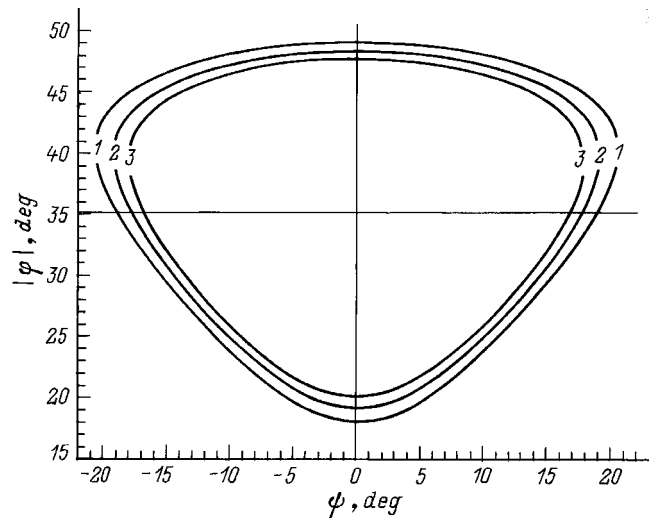


Рис. 3. Возможные значения углов φ и ψ , соответствующие определенным значениям ρ_1/ρ_2 , для комплексов триклинной симметрии. ρ_1/ρ_2 : 1 — 4.6, 2 — 5.2, 3 — 5.8. Для комплексов моноклинной симметрии возможные значения φ отвечают $\psi = 0$.

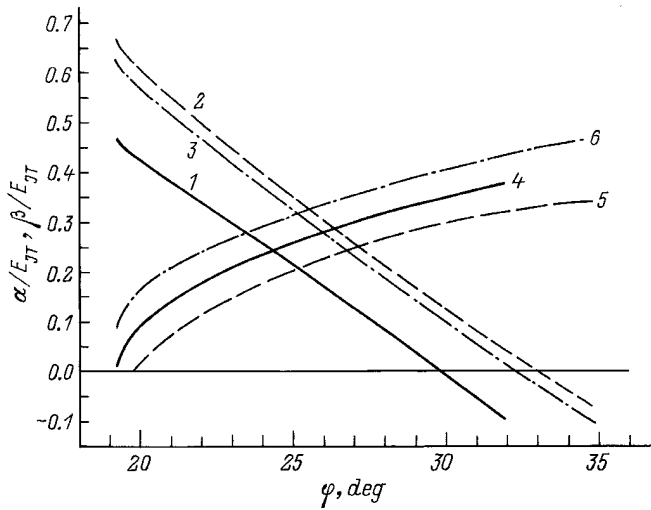


Рис. 4. Значения α/E_{JT} и β/E_{JT} , соответствующие $\rho_1/\rho_2 = 5.2$ в области значений φ , допустимых для триклинной конфигурации комплекса. 1÷3 — α/E_{JT} , 4÷6 — β/E_{JT} . 1, 4; 2, 5; 3, 6 — три значения, полученные из решения трех различных пар уравнений (11).

Полученные данные могут быть использованы для сравнения относительного влияния донора в комплексах $V_{Ga}Sn_{Ga}$, $V_{Ga}Si_{Ga}$ и $V_{Ga}Te_{As}$. Для изолированной вакансии ($\alpha = \beta = \beta^* = 0$), подверженной только тригональному искажению в силу эффекта Яна–Теллера, ось оптического диполя совпадает с одним из направлений $\langle 111 \rangle$. Любое отклонение оси оптического диполя комплекса от этого направления связано с влиянием донора, поэтому естественно оценить силу этого влияния по абсолютной величине угла ξ между осью оптического диполя ком-

плекса и соответствующей осью $\langle 111 \rangle$. Угол ξ связан с φ и ψ соотношением

$$\cos \xi = \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2} \cos \varphi \cos \psi + \sin \varphi). \quad (15)$$

Его абсолютная величина для комплексов $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$ в области значений ψ и соответствующих им положительных значений φ , представленной на рис. 3, показана на рис. 6. Там же показано значение ξ для комплексов $V_{Ga}Te_{As}$ (в этом случае $\psi = 0$). Видно, что для комплексов $V_{Ga}Sn_{Ga}$ и $V_{Ga}Si_{Ga}$ величина ξ ниже, чем для комплексов $V_{Ga}Te_{As}$. Этого и следовало ожидать, поскольку в комплексе $V_{Ga}Te_{As}$ донор расположен ближе к вакансии и его влияние должно быть больше.

5. Заключение

Проведенный анализ 1.2 эВ полосы ФЛ кристаллов GaAs:Sn и GaAs:Si с концентрацией доноров $\sim 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при низкой температуре и резонансном поляризованном возбуждении показал, что поглощение и излучение света комплексами, ответственными за эту полосу, в классическом однодипольном приближении аппроксимируется суперпозицией ротатора и осциллятора, в которой доля ротатора составляет $\sim 17 \div 18\%$. Направления оси этих диполей, удовлетворяющие экспериментальным величинам поляризации, могут быть выбраны так, чтобы они соответствовали модели комплекса $V_{Ga}D_{Ga}$, предполагающей на основании ряда других экспериментальных результатов, что влияние донора на вакансионные орбитали дырки, локализованной на дефекте, мало по сравнению с влиянием взаимодействия

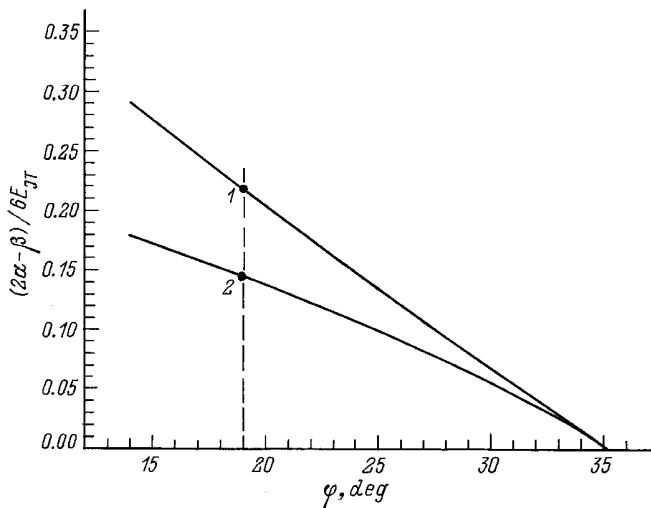


Рис. 5. Значения величин $(2\alpha - \beta)/6E_{JT}$ для комплекса моноклинной симметрии. Точками показаны значения, соответствующие $\rho_1/\rho_2 = 5.2$ для моноклинной конфигурации комплекса. 1, 2 — два значения, полученные из решения каждого из двух уравнений (13).

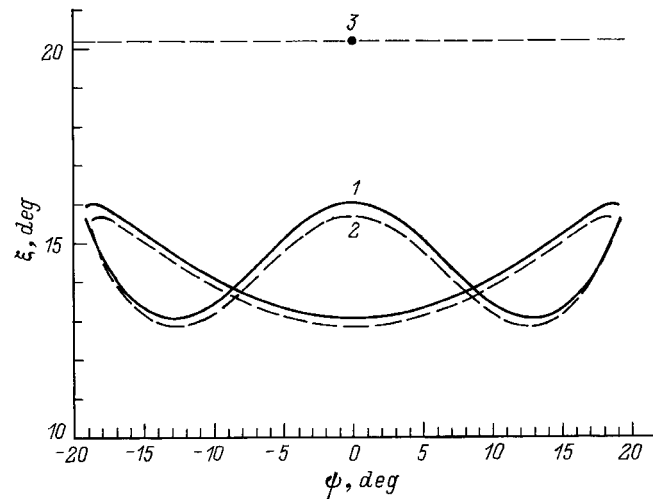


Рис. 6. Возможные абсолютные значения угла отклонения оси диполя комплекса $V_{Ga}D$ от оси $\langle 111 \rangle$, соответствующей направлению ян-теллеровской дисторсии изолированной V_{Ga} . 1 — $V_{Ga}Sn_{Ga}$, 2 — $V_{Ga}Si_{Ga}$, 3 — $V_{Ga}Te_{As}$. ρ_1/ρ_2 : 1 — 5.2, 2 — 5.4, 3 — 3.3. $\varphi > 0$.

этой дырки с F_2 -модой колебаний исходно тетраэдрического комплекса (эффект Яна–Теллера) [6]. При этом результаты экспериментов могут быть объяснены как в случае, если минимальной полной энергии дефекта соответствует одна конфигурация комплекса с моноклинной симметрией, так и в случае, если такой энергии соответствуют две эквивалентные конфигурации триклинной симметрии. В обоих случаях отклонение оси оптического диполя комплекса от оси типа $\langle 111 \rangle$, соответствующей направлению оси диполя изолированной вакансии, искаженной из-за эффекта Яна–Теллера, для комплексов $V_{\text{Ga}}\text{Sn}_{\text{Ga}}$ и $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$ меньше, чем для комплексов $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$. Последнее означает, что влияние донора на вакансионные орбитали для $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ больше, чем для $V_{\text{Ga}}\text{Sn}_{\text{Ga}}$ и $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$. Это качественно согласуется с различием в положении донора относительно вакансии в этих комплексах.

Список литературы

- [1] E.W. Williams. Phys. Rev., **168**, 922 (1968).
- [2] S.Y. Chiang, G.L. Pearson. J. Lumm., **10**, 313 (1975).
- [3] И.А. Буянова, С.С. Остапенко, М.К. Шейкман. ФТТ, **27**, 748 (1985).
- [4] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, М.А. Решиков, В.Е. Седов, В.Р. Сосновский. ФТП, **25**, 50 (1991).
- [5] А.А. Гуткин, М.А. Решиков, В.Р. Сосновский. ФТП, **27**, 1516 (1993).
- [6] А.А. Гуткин, М.А. Решиков, В.Е. Седов. ФТП, **30**, 1123 (1996).
- [7] А.А. Гуткин, М.А. Решиков, В.Е. Седов. ФТП, **31**, 1062, (1997).
- [8] A.A. Gutkin, N.S. Averkiev, M.A. Reshchikov, V.E. Sedov. In: *Defects in Semiconductors* 18, ed. by M. Suezawa and H. Katayama-Yoshida (Mater. Sci. Forum, **196-201**, pt. 1, 1995) p. 231.
- [9] N.S. Averkiev, A.A. Gutkin, S.Yu. Il'inskii, M.A. Reshchikov, V.E. Sedov. Zeitschrift für Physicalische Chemie, **200**, 209 (1997).
- [10] F.C. Rong, W.A. Barry, J.F. Donegan, G.D. Watkins. Phys. Rev. B, **54**, 7779 (1996).
- [11] Е.Е. Букке, Н.Н. Григорьев, М.В. Фок. Тр. ФИАН, **79**, 108 (1974).

Редактор В.В. Чалдышев

Optical characteristics of the 1.18 eV luminescence band complexes in n -GaAs : Sn(Si): results of the photoluminescence study at polarized resonant excitation

A.A. Gutkin, T. Piotrowski*, J. Pultorak*, M.A. Reshchikov, V.E. Sedov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

* Institute of Electron Technology,
02-668 Warsaw, Poland

Abstract Experimental values of polarization of the low-temperature luminescence from the $V_{\text{Ga}}\text{Sn}_{\text{Ga}}$ and $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$ complexes in n -GaAs at resonant excitation by polarized light travelling along the [110] or [100] crystal axis have been compared with expressions obtained in classic dipole approximation for defects with triclinic or monoclinic symmetry. It is shown that contribution of rotator to a superposition of rotator and oscillator describing the emission of the complexes is 17÷18%. Direction of the axis of the dipoles, matching the experimental data, is consistent with supposition that the donor effect on the vacancy orbitals of a hole localized on the complex is lower than the Jahn–Teller effect. The resulting symmetry of the complex may be as monoclinic, so triclinic. In both cases, deviation of the optical dipole axis of the complex from direction of the dipole axis of isolated V_{Ga} distorted due to the Jahn–Teller effect is lower for the $V_{\text{Ga}}\text{Sn}_{\text{Ga}}$ and $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$ complexes than for the $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ complexes. It follows from the latter that the donor effect on electron structure of the $V_{\text{Ga}}\text{Te}_{\text{As}}$ complexes is stronger than that in the $V_{\text{Ga}}\text{Sn}_{\text{Ga}}$ and $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$ complexes. This correlates with the difference in donor position in these complexes.