

Влияние полей случайно расположенных заряженных центров на поляризацию люминесценции

© Е.Б. Осипов, В.Б. Борисов, Н.О. Сорокина, Н.А. Осипова

Череповецкий государственный университет,
162600 Череповец, Россия

(Поступила в Редакцию 10 февраля 1999 г.
В окончательной редакции 28 июля 1999 г.)

Рассматривается влияние случайно расположенных заряженных центров в кристалле на поляризацию люминесценции, связанную с ян-теллеровскими центрами в условиях однородной деформации.

Внутрикристаллические случайные электрические и деформационные поля, искажающие периодичность решетки, создаются заряженными примесями и другими неоднородностями в кристалле. Достаточно детально роль случайных полей в образовании примесных зон и в переходах металл–диэлектрик проанализирована в [1]. Влияние же этих полей на характеристики низкотемпературной люминесценции рассматривается в основном эмпирически и при анализе экспериментальных результатов сводится к введению эффективной температуры, превышающей температуру реального эксперимента. Расщепления уровней нейтральных акцепторов, обусловленные случайными полями, в среднем малы и в большинстве случаев их можно не учитывать, однако их роль велика в условиях, когда внешние воздействия сравнимы по величине с влиянием случайных полей и с воздействием температурного фактора [2].

Интересным является выяснение роли случайных полей в выстраивании ян-теллеровских центров [3,4] в поле внешней деформации и влияние этих полей на связанную с этим выстраиванием поляризацию люминесценции.

Будем предполагать, что расщепления, вызываемые случайными полями, много меньше ян-теллеровских, создаваемых ближайшим окружением центров. При этом так же как в [3,4], рассмотрим взаимодействие дырки, локализованной на акцепторе с локальными колебаниями E -типа. В отсутствие внешней деформации с учетом нелинейного по Q взаимодействия имеем три минимума адиабатического потенциала, соответствующих внутреннему сжатию вдоль осей X , Y , Z (направлений [100], [010], [001] соответственно).

Матрица взаимодействия дырки центра в Γ_8 -состоянии с квазилокальными искажениями решетки, описываемыми нормальными координатами Q_2 и Q_3 E -типа, выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix} q_2 & 0 & q_3 & 0 \\ 0 & -q_2 & 0 & q_3 \\ q_3 & 0 & -q_2 & 0 \\ 0 & q_3 & 0 & q_2 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$q_2 = \frac{3}{2} b' Q_2 + B'' (Q_3^2 - Q_2^2), \quad q_3 = \frac{3}{2} b' Q_2 + B'' Q_2 Q_3, \quad (2)$$

где b' и B'' — константы линейного и квадратичного по нормальным координатам взаимодействий с E -колебаниями. Для энергии вырожденного основного уровня получаем значение

$$E = -\sqrt{q_2^2 + q_3^2}. \quad (3)$$

Поверхности адиабатического потенциала имеют три абсолютных минимума, соответствующих тетрагональным искажениям примесного комплекса, а волновые функции представлены в виде разложения по базисным функциям

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{1}{N} \left((q_2 - E) \Psi_{3/2 \ 1/2} - q_3 \Psi_{3/2-3/2} \right), \\ \Psi_2 &= \frac{1}{N} \left(-q_3 \Psi_{3/2 \ 3/2} + (q_2 - E) \Psi_{3/2-1/2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Рассмотрим излучательную рекомбинацию электронов зоны проводимости и дырок нейтральных ян-теллеровских акцепторов, ориентированных в направлениях [100], [010], [001].

Вероятности переходов прямо пропорциональны квадратам модулей матричных элементов переходов [5] электронов со дна зоны проводимости на акцепторные уровни.

Для ян-теллеровских акцепторов, ось внутреннего искажения которых направлена вдоль Z [001],

$$\Psi_1 = \Psi_{3/2 \ 1/2}, \quad \Psi_2 = \Psi_{3/2-1/2}. \quad (5a)$$

Отношение вероятностей переходов с испусканием излучения, поляризованного вдоль оси искажения и в перпендикулярном направлении,

$$w_z/w_x = 4.$$

Если внутреннее искажение направлено вдоль X [100], то

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{1}{2} \Psi_{3/2 \ 1/2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_{3/2-3/2}, \\ \Psi_2 &= -\frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_{3/2 \ 3/2} + \frac{1}{2} \Psi_{3/2-1/2}. \end{aligned} \quad (5b)$$

Отношение вероятностей в этом случае равно $w_z/w_x = 1/4$.

При внутреннем искажении вдоль Y [010]

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{1}{2}\Psi_{3/2\ 1/2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_{3/2-3/2}, \\ \Psi_2 &= \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_{3/2\ 3/2} + \frac{1}{2}\Psi_{3/2-1/2}.\end{aligned}\quad (5c)$$

Отношение $w_z/w_x = 1$.

Полагаем, что добавки к энергии ян-теллеровского центра от случайного поля и поля внешней деформации малы по сравнению с величинами барьеров между минимумами адиабатического потенциала, существование которых обусловлено нелинейным электронно-колебательным взаимодействием.

Выберем начало сферической системы координат в центре нейтрального акцептора, направим ось Z вдоль оси внешнего давления и, взяв волновые функции типа (5) для искажений его вдоль направлений X , Y , Z в качестве нулевого приближения, усредним на них кулоновскую энергию дырки акцептора в поле случайно расположенного в точке со сферическими координатами (R, θ, φ) заряженного центра. Добавки к энергии в минимумах адиабатического потенциала, соответствующих внутреннему сжатию вдоль направлений X [100], Y [010] и Z [001], равны соответственно

$$E_{100} = \frac{3}{20} \left(1 - 3 \cos^2 \theta + 3 \sin^2 \theta \cos 2\varphi \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2 r_0^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3} + \frac{b\mathcal{E}_1}{2},$$

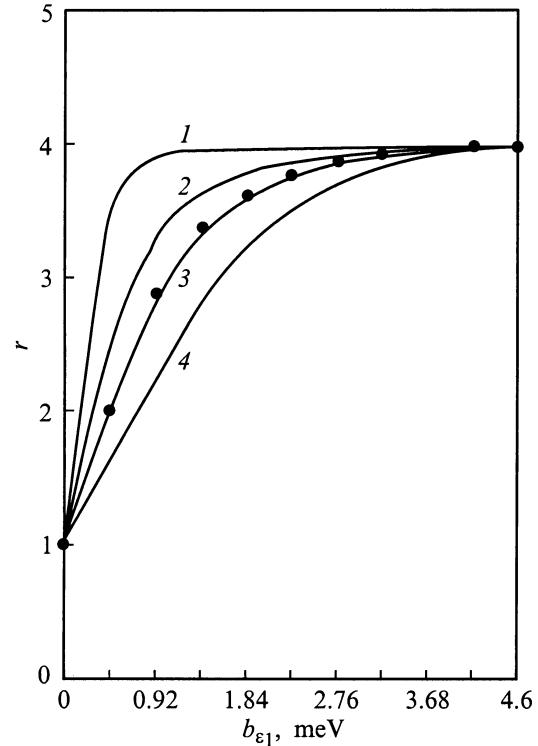
$$E_{010} = \frac{3}{20} \left(1 - 3 \cos^2 \theta - 3 \sin^2 \theta \cos 2\varphi \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2 r_0^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3} + \frac{b\mathcal{E}_1}{2},$$

$$E_{001} = -\frac{3}{10} \left(1 - 3 \cos^2 \theta \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2 r_0^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3} b\mathcal{E}_1. \quad (6)$$

Здесь $Z_1 e$ — заряд случайного центра, Z_2 — число дырок на нейтральном акцепторе, r_0 — радиус связанного состояния дырки нейтрального акцептора, асимптотика волновой функции которой в соответствии с [1] определяется массой легких дырок, ϵ — диэлектрическая проницаемость материала (для GaAs в дальнейших расчетах принимаем $\epsilon = 12$), $\mathcal{E}_1 = \mathcal{E}_{zz} - \mathcal{E}_{xx}$, где \mathcal{E}_{zz} и \mathcal{E}_{xx} — компоненты тензора деформации, b — константа деформационного потенциала.

Формулы (6) описывают влияние электрического поля на состояние ян-теллеровского акцептора, соответствующие наличию у последнего квадрупольного и отсутствию дипольного момента. Отметим, что влияние электрического поля на ориентацию дисторсий вакансий в полупроводниках рассматривалось в работе [6], где формулы (9), (10) соответствуют дипольным (более сильным, чем квадрупольные) поправкам к энергии в электрическом поле.

Интегральное поляризационное отношение люминесценции, обусловленной излучательной рекомбинацией



Расчетная зависимость интегрального поляризационного отношения r от величины $b\mathcal{E}_1$ при давлении вдоль оси [001]. Кривые 1–4 — расчетные зависимости, построенные для значения параметра $r_0 = 20 \cdot 10^{-8}$ см и концентраций заряженных центров $n = 1 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$, $1 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$, $2 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$, $4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ соответственно; квадратики — экспериментальные точки [4] ($b = 3.15$ eV).

электронов зоны проводимости и дырок нейтральных ян-теллеровских акцепторов, определим выражением

$$r = \frac{I_{\parallel}}{I_{\perp}}. \quad (7)$$

Здесь I_{\perp} , I_{\parallel} — интенсивность излучения с вектором электрической напряженности, перпендикулярным и параллельным оси давления. Интенсивность излучения прямо пропорциональна вероятностям переходов электронов со дна зоны проводимости на акцепторные уровни и заселенности этих уровней.

Полагая, что заполнение состояний адиабатического потенциала примесного комплекса подчиняется распределению Больцмана, получаем следующие выражения для интенсивностей поляризованных компонент излучения в поле внешней деформации $\parallel Z$ и в случайном поле:

$$dI_{\parallel} = \frac{e^{-E_{100}/kT} + e^{-E_{010}/kT} + 4e^{-E_{001}/kT}}{e^{-E_{100}/kT} + e^{-E_{010}/kT} + e^{-E_{001}/kT}} dW, \quad (8)$$

$$dI_{\perp} = \frac{4e^{-E_{100}/kT} + e^{-E_{010}/kT} + e^{-E_{001}/kT}}{e^{-E_{100}/kT} + e^{-E_{010}/kT} + e^{-E_{001}/kT}} dW, \quad (9)$$

где dW — вероятность попадания заряженного случайно центра в элемент сферического объема при условии, что на меньшем расстоянии нет других заряженных примесей.

В случае не очень больших концентраций примесей (меньших $10^{18} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) для компенсированных полупроводников считаем, что наиболее сильное расщепление нейтрального акцептора вызывает наиболее близко расположенный к нему заряженный центр. При этом в силу редкости расположения действием других заряженных центров можно пренебречь, и для распределения вероятности dW может быть получено выражение [7]

$$dW = \exp\left(-\frac{4}{3}\pi n R^3\right) n R^2 dR \sin\theta d\theta d\varphi,$$

где n — концентрация заряженных центров.

Выполнив интегрирование по координатам случайных заряженных центров, найдем интегральные интенсивности поляризованных компонент излучения, которые определяют поляризационное отношение.

Результат произведенного расчета r для ян-теллеровского центра Cu_{Ga}^0 в GaAs [4] при $T = 2 \text{ K}$ и различных значениях концентрации заряженных примесей приведен на рисунке. Из него видно, что расчетная зависимость хорошо согласуется с экспериментальной при значении концентрации $n = 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Список литературы

- [1] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М. (1979). 416 с.
- [2] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972). 584 с.
- [3] Н.С. Аверкиев, З.А. Адамия, Д.И. Аладашвили, Т.К. Аширов, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, В.Е. Седов. ФТП **21**, 3, 421 (1987).
- [4] Н.С. Аверкиев, Т.К. Аширов, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, В.Е. Седов, А.Ф. Цацульников. ФТП **25**, 11, 1967 (1991).
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Наука, М. (1989). 767 с.
- [6] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, С.Ю. Ильинский. ФТТ **40**, 12, 2161 (1998).
- [7] A. Miller, E. Abrahams. Phys. Rev. **120**, 745 (1960).