

СИММЕТРИЯ $EL2$ -ЦЕНТРА В GaAs

Н.Т.Баграев

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе АН СССР
194021, Ленинград

Поступила в редакцию 9 апреля 1991 г.

После переработки 12 мая 1991 г.

Оптическое поглощение в условиях одноосного сжатия монокристаллов GaAs позволяет идентифицировать модель $EL2$ -центра, в рамках которой зарядовые состояния двойного донора (D^0, D^+ и D^{++}) проявляют C_{3v} -симметрию и формируются соответственно из волновых функций L , Γ и X долин зоны проводимости.

Глубокий двойной донор $EL2$ в GaAs ($D^0/D^+ \rightarrow E_c - 0,75$ эВ - уровень $EL2$, $D^+/D^{++} \rightarrow E_v + 0,52$ эВ) является постоянным объектом различных исследований, поскольку его присутствие в монокристаллах и эпитаксиальных слоях обеспечивает одновременно высокую подвижность носителей и полуизолирующие свойства материала¹. Основу $EL2$ -центра составляет антиструктурный донор As_{Ga} , что проявляется в полной корреляции спектральных зависимостей "фамильного" тушения (1,0 ÷ 1,3 эВ) фотоемкости, фотопроводимости и соответствующего спектра ЭПР¹⁻³. Более того, согласно данным ЭПР, ДЭЯР и пьезоэмоксностной спектроскопии, $EL2$ -центр ассоциируется с комплексом $As_{Ga} + As_i$, вследствие чего имеет C_{3v} - симметрию⁴⁻⁶. Однако, результаты исследований оптического поглощения в условиях одноосного сжатия монокристаллов GaAs, содержащих $EL2$ -центры, интерпретируются в рамках модели изолированного As_{Ga} -дефекта T_d -симметрии^{7,8}. Причем, поведение бесфононной линии 1,039 эВ свидетельствует о внутрицентровом характере оптических переходов, ответственных за отмеченные выше процессы тушения, которые обусловлены трансформацией $EL2$ -центра в метастабильное состояние⁷. Таким образом, вопрос о природе метастабильного состояния и симметрии $EL2$ -центра остается открытым. В настоящей работе модель $EL2$ -центра идентифицируется на основе данных комплексного исследования оптического поглощения в условиях как всестороннего, так и одноосного сжатия монокристаллов GaAs. Демонстрируется взаимосвязанность метастабильных свойств и симметрии различных зарядовых состояний глубокого дефекта со структурой зоны проводимости.

Пьезоспектроскопические исследования оптического пропускания (0,8 ÷ 1,3 эВ) образцов GaAs n -типа⁹ [$n(77\text{ K}) = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$], полученных по методу Бриджмена, выполнялись при $T = 4,2$ К в условиях всестороннего и одноосного сжатия. В последнем случае использовались монокристаллы GaAs ($3 \times 3,5 \times 7$ мм), наибольшая длина которых была ориентирована вдоль одной из кристаллографических осей ($[111]$, $[100]$ или $[110]$) и соответствовала направлению сжатия. Причем, измерения проводились как в параллельной, так и перпендикулярной поляризации света относительно направления одноосного сжатия. Следует отметить, что интенсивность монохроматического света поддерживалась на низком уровне, чтобы не допустить трансформации $EL2$ -центра в метастабильное состояние.

В ходе исследований были получены спектры оптического поглощения (рис.1а, б) изучение которых позволило определить изменения в энергетических позициях бесфононной линии (1,039 эВ) и оптического перехода

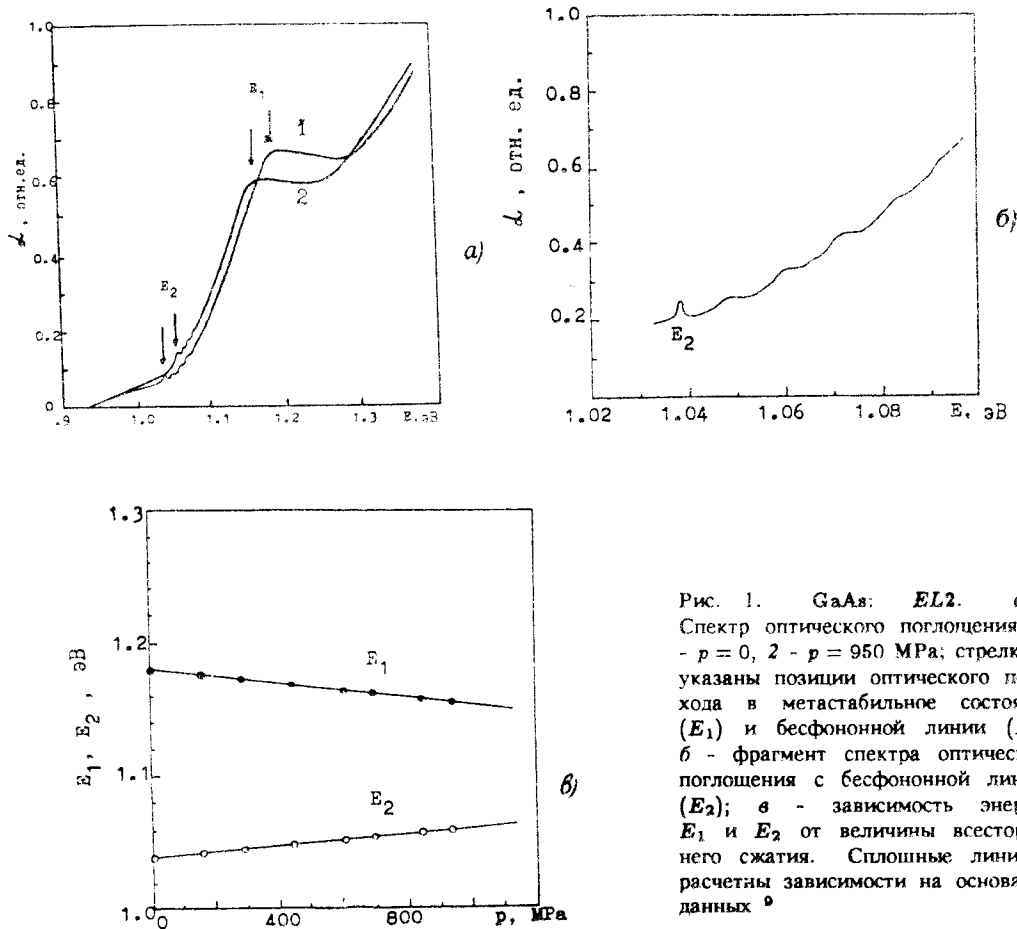


Рис. 1. GaAs: EL2. а - Спектр оптического поглощения: 1 - $p = 0$, 2 - $p = 950$ МПа; стрелками указаны позиции оптического перехода в метастабильное состояние (E_1) и бесфононной линии (E_2); б - фрагмент спектра оптического поглощения с бесфононной линией (E_2); в - зависимость энергий E_1 и E_2 от величины всестороннего сжатия. Сплошные линии - расчетны зависимости на основании данных ⁹

EL2-центра в метастабильное состояние (1,18 эВ) в зависимости от величины всестороннего сжатия (рис.1в). Видно, что с ростом давления энергия оптимального перехода в метастабильное состояние E_1 (в полосе 1,0 ÷ 1,3 эВ) уменьшается, тогда как бесфононная линия (E_2) перемещается в область более высоких энергий. При этом частота фононных повторений (11 мэВ) остается неизменной. Полученные результаты хорошо согласуются с данными ⁸ и показывают, что исследуемые оптические переходы (E_1 и E_2) индуцируются различными зарядовыми состояниями EL2-центра в GaAs. Величины сдвигов ΔE_1 и ΔE_2 полностью коррелируют с соответствующими изменениями в энергетических зазорах между долинами зоны проводимости GaAs ⁹ (рис.1в): $\Delta E_1 = \Delta_{X\Gamma}(p)$, $\Delta E_2 = -\Delta_{L\Gamma}(p)$.

Подобная взаимосвязанность оптических переходов со структурой зоны проводимости объясняется в рамках модели глубокого центра с немонотонной зависимостью константы электрон-колебательного взаимодействия от зарядового и спинового состояния (рис.2). В этом случае глубокий дефект представляет собой туннельную систему, в которой решеточные позиции различных зарядовых состояний характеризуются разной симметрией и принадлежностью соответствующей долине зоны проводимости. Применительно к EL2-центру в GaAs, D^+ -состояние занимает позицию в узле решетки и формируется из волновых функций Γ -долины зоны проводимости, тогда как D^0 - и D^{++} -состояния находятся в тетраэдрическом и гексагональном междоузлиях и принадлежат L и X долинам, соответственно (рис.2). Ины-

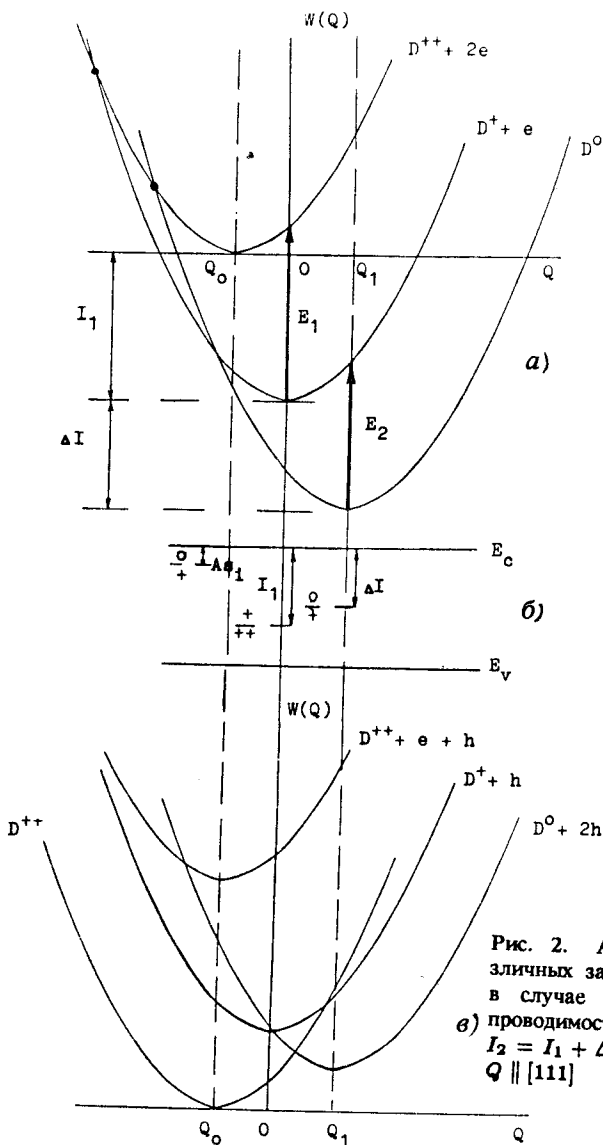
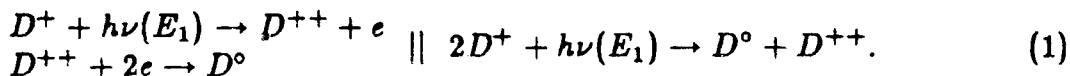


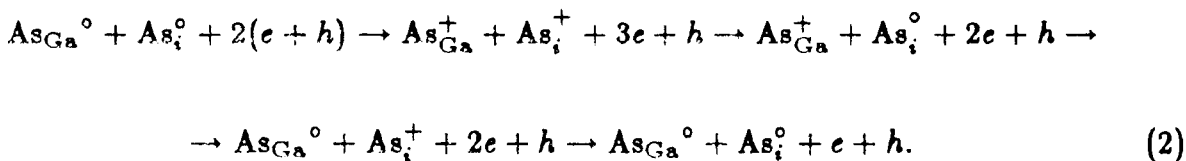
Рис. 2. Адиабатические потенциалы (а, в) различных зарядовых состояний $EL2$ -центра в GaAs в случае оптических переходов дефект - зона (а) проводимости (а) и валентная зона-дефект (в); $I_2 = I_1 + \Delta I$; (б) - эквивалентная зонная схема; $Q \parallel [111]$

ми словами, состояние $D^0 = (As_i V_{Ga})^0$ имеет C_{3V} -симметрию, а $EL2$ -уровень формируется из волновых функций L -долины. На первый взгляд, D^+ - и D^{++} -состояния должны иметь соответственно T_d и D_{2d} симметрию. Однако, симметрия D^+ -состояния понижается до C_{3V} из-за реконструкции ближайшего узла мышьяка ($As_i V_{As}$), что отражается в данных ДЭЯР, идентифицирующих $EL2$ -центр как комплекс $As_{Ga} + As_i$.⁵ Симметрия D^{++} -состояния также стремится к C_{3V} , но уже вследствие эффекта Штарка, индуцированного присутствием компенсирующих акцепторов¹⁰. Таким образом, оптический переход $D^0 \rightarrow D^+$, оптимум которого соответствует бесфононной линии (рис.2а), сопровождается туннелированием $EL2$ -центра из тетраэдрического междоузлия в узел решетки, что приводит к междолинному рассеянию электрона ($\Delta E_2 = -\Delta E_{L\Gamma}(p)$), фотовозбужденного с $EL2$ -уровня в L -долину зоны проводимости. Наиболее ярко это проявляется в условиях всестороннего сжатия монокристаллов GaAs (рис.1в). Аналогичным образом претерпевает междолинное рассеяние электрон, фотовозбужденный в Γ -долину зоны проводимости в результате D^+ / D^{++} -перехода ($\Delta E_1 = \Delta E_{\Gamma\Gamma}(p)$).

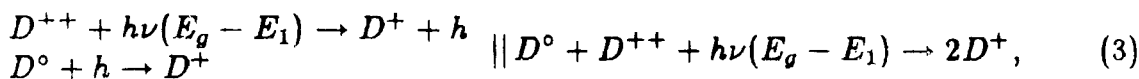
В ходе продолжительной накачки светом $h\nu = E_1$ начинают доминировать процессы двухэлектронного захвата ¹⁰, которые стимулируют трансформацию в метастабильное состояние остаточной концентрации однократнозаряженных $EL2$ -центров (рис.2а):



Переход в метастабильное состояние сопровождается резким снижением времени жизни неравновесных носителей за счет возникновения дополнительных каналов оже-рекомбинации с участием междоузельного мышьяка вблизи антиструктурного донора:



Подобная сверхбыстрая рекомбинация неравновесных носителей может быть причиной тушения фотоемкости, фотопроводимости и ЭПР-спектров в GaAs с $EL2$ -центрами ⁴⁻⁶. Адекватной проверкой модели метастабильности $EL2$ -центра GaAs явилось с одной стороны, обнаружение оптической регенерации D^+ -состояния при $h\nu = E_g - E_1$ (рис.2б) ¹¹:



а, с другой стороны, хорошее согласие между определенной экспериментально энергией термического отжига метастабильного состояния ⁴ и величиной энергетического барьера реакции $D^0 + 2h \rightarrow D^+ + h$ (рис.2б), ответственной за термическую регенерацию D^+ -состояния.

Структура зоны проводимости влияет также на процессы оптического поглощения при одноосном сжатии монокристаллов GaAs с $EL2$ -центрами (рис.3). Наибольшее расщепление бесфононной линии было обнаружено при сжатии вдоль оси [111]. Сжатие монокристалла в направлении [100] не приводило к расщеплению бесфононной линии E_2 , тогда как в условиях $\bar{\sigma} || [110]$ наблюдались три ее компоненты, поведение которых свидетельствует о наличии динамического эффекта Яна - Теллера. Характеристики индуцированных расщеплений спектральных линий, соответствующих разрешенным переходам в системе центров разной симметрии в кубических кристаллах, были рассчитаны А.А.Каплянским ¹². Существуют следующие основные критерии расщеплений: интенсивность, степень поляризации и число расщепленных компонент, а также - величины их сдвигов от нерасщепленной позиции спектральной линии. Принимая во внимание данные ¹², результаты настоящей работы (рис.3) адекватно указывают на C_{3v} -симметрию $EL2$ -центра в GaAs. Полная картина расщеплений бесфононной линии находится в хорошем согласии с результатами исследований влияния одноосного сжатия на расщепление L -долины зоны проводимости, полученными с помощью "горячей" фотолюминесценции ¹³. В частности, величина сдвига бесфононной линии при $\bar{\sigma} || [100]$ (рис.3б) соответствовала междолинному расщеплению: $\Delta = -1/3\Delta_{LG}$. Это также является независимым подтверждением принадлежности уровня $EL2$ L -долине зоны проводимости и объясняет наличие бесфононной линии в спектральной зависимости фототока ¹⁴. Таким образом, изучение оптического поглощения в условиях всестороннего и одноосного сжатия монокристаллов

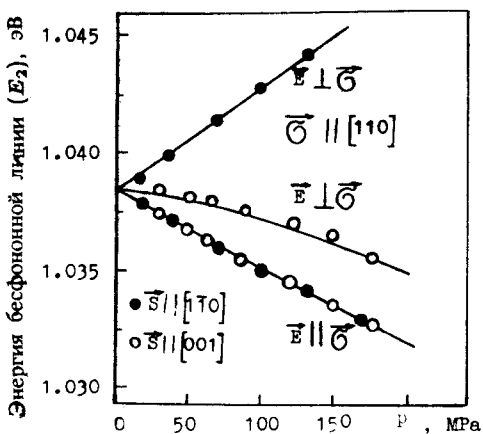
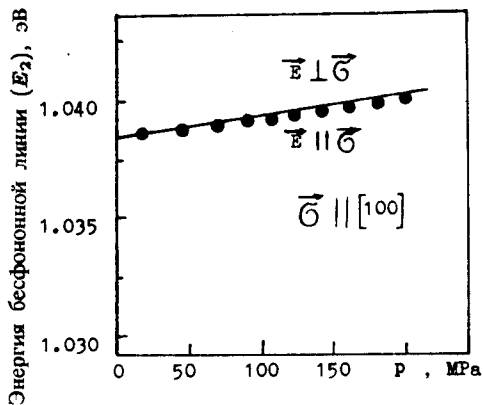
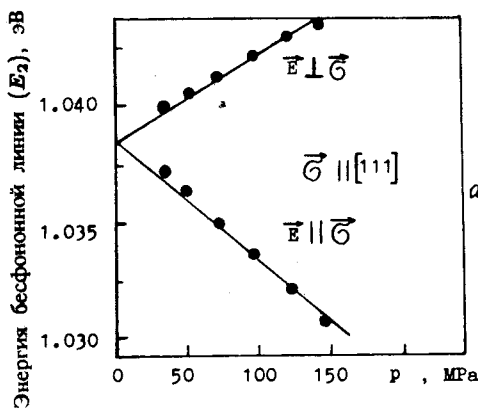


Рис. 3. Зависимость энергии бесфононной линии от величины одноосного сжатия. Сплошная линия на рис.3б - зависимость $|1/3\Delta_{LG}(p)|$ по данным работы ¹³

GaAs показало, что D^0 -, D^+ - и D^{++} -состояния $EL2$ -центра имеют C_{3v} -симметрию и формируются соответственно из L , Γ и X долин зоны проводимости. Переход $EL2$ -центра в метастабильное состояние обусловлен процессами оптической перезарядки типа $2D^+ \rightarrow D^0 + D^{++}$ и сопровождается туннелированием антиструктурного донора из узла решетки (D^+ -состояние) в тетраэдрическое междоузлие (D^0 -состояние).

Литература

1. Martin G.M., Makram-Ebeid S. In Deep Centers in Semiconductors, New York, 1986, Gordon&Breach, p.399.
2. Vincent G., Bois D., Chantre A. J. Appl. Phys., 1982, 53, 3643.
3. Weber E., Schneider J. Physica, 1983, 116B, 398.
4. von Bardeleben H.J., Stievenard D., Deresmes D., Huber A., Bourgoin J.C. Phys. Rev. B, 1986, 34, 7192.

5. Meyer B.K., Hofmann D.M., Spaeth J.-M. Materials Science Forum, 1986, 10-12, 311
 6. Levinson M., Kafalas J.A. Phys. Rev. B, 1987, 35, 9383.
 7. Kaminska M., Skowronski M., Kuszko W. Phys. Rev. Lett., 1985, 55, 2204.
 8. Baj M., Dreczer P. Materials Science Forum, 1989, 38-41, 101.
 9. Chang K.J., Froyen S., Cohen M.L. Solid State Comm., 1984, 50, 105.
 10. Bagraev N.T., Mashkov V.A. Solid State Comm., 1988, 65, 1111.
 11. Bagraev N.T., Kolchanova N.M., Mashkov V.A., Polovtsev I.S. Materials Science Forum, 1989, 38-41, 1176.
 12. Kaplyanskii A.A. J. de Physique, 1967, C4, 39.
 13. Mirlin D.N., Sapega V.F., Karlik I.Ya., Katilius R. Solid State Comm., 1987, 61, 799.
 14. Mochizuki Y., Ikoma T. Materials Science Forum, 1986, 10-12, 323.
-